N.º duplo 3/4 • 84 • esc. 300$00
JUNHO 1985

técnica

Revista de Engenharia

Publicação da Associação dos Estudantes do Instituto Superior Técnico

técnica
revista de engenharia . aeist

PROPRIEDADE
DA ASSOCIAÇÃO DOS ESTUDANTES DO INSTITUTO SUPERIOR TÉCNICO

DIRECTOR
M. DE ABREU FARO

COORDENADOR EDITORIAL
J. ANTUNES BARATA

DIRECÇÃO E ADMINISTRAÇÃO
AEIST • Av. Rovisco Pais
1000 LISBOA • Tels. 88 93 23 / 88 10 18

PUBLICIDADE
TÉCNICA • AEIST • Av. Rovisco Pais - 1000 LISBOA - Tels. 88 10 18 / 89 75 15

COMPOSIÇÃO E IMPRESSÃO
CABOGRÁFICA, LDA.
Rua das Biscoiteiras, Lote 18 (Traseiras) — 2795 LINDA-A-VELHA

PUBLICAÇÃO TRIMESTRAL • 5000 EXEMPLARES

ASSINATURAS (4 números)
PORTUGAL 500$00 • ESTRANGEIRO 12 US$

N. 3/4 . 84 . JUNHO 1985

índice de artigos

artigos convidados

9 ESPECTROMETRIA DE PERDA DE ENERGIA DE ELECTRÕES
J. LOPES DA SILVA

32 MODELAÇÃO DE TRANSISTORES BIPOLARES E MÓS DE POTÊNCIA
Excertos da obra científica do
PROF. PEDRO LUÍS BORGES TEIXEIRA
M.J.A. LANÇA, J.P.C. TEIXEIRA e **J.J.L.C. FREIRE**

47 AS INTERFACES ENTRE AS FONTES DE ENERGIA ALTERNATIVAS E AS DISTRIBUIÇÕES DE ENERGIA ELÉCTRICA EM ÁREAS RURAIS ISOLADAS
DOMINGOS MOURA

artigos

56 AUTOMATIZAÇÃO DO MÉTODO DAS FORÇAS NA ANÁLISE DE PÓRTICOS RECTANGULARES
J.A. TEIXEIRA DE FREITAS e **E.M.B. RIBEIRO PEREIRA**

64 SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DO GOLPE DE ARÍETE EM SISTEMAS ELEVATÓRIOS COM CONDUTAS DE ASPIRAÇÃO LONGAS
A. BETÂMIO DE ALMEIDA e **P. FALCÃO E CUNHA**

77 DETERMINAÇÃO DE DISTÂNCIAS INTERATÓMICAS A PARTIR DA ESTRUTURA FINA QUE SE PROLONGA PARA ALÉM DA DESCONTINUIDADE DE ABSORÇÃO DOS RAIOS X
MARIA ISABEL GASPAR DE BARROS ALVES MARQUES

notas científicas

88 A GENERALIZED INTEGRAL CHARGE RELATION FOR BIPOLAR DEVICES
P.L. BORGES TEIXEIRA

91 COQRDINATES TRANSFORMATION FROM THE PRINCIPLE OF RELATIVITY
M. DE ABREU FARO

95 EXPERIMENTAL RESULTS OF THE CONDITIONAL SIMULATION OF AN IRON OREBODY
ANTÓNIO JORGE DE SOUSA

98 MODELLING OF AN INDUCTION MOTOR SPEED CONTROL WITH SLIP-POWER RECOVERY
J. SANTANA e **J. GONÇALVES DENTE**

102 STRIP GRATING LEAKY-WAVE ANTENNA
A.M. BARBOSA e **J. FIGANIER**

105 Acerca do artigo
SOBRE A REPRESENTAÇÃO ANALÍTICA DE RESULTADOS EXPERIMENTAIS
P. DE VARENNES E MENDONÇA

NORMAS PARA ADMISSÃO DE TRABALHOS E INSTRUÇÕES PARA OS AUTORES

1. A Revista TÉCNICA, em princípio, publicará anualmente quatro números de natureza técnico-científica.

2. Atendendo ao espaço disponível e carácter científico que se deseja imprimir à Revista, as três formas de publicação previstas, revestir-se-ão das seguintes características:

ARTIGOS POR CONVITE — Trabalho de síntese, no domínio da investigação científica ou no domínio do desenvolvimento, contemplando actividade desenvolvida entre nós, ou pelo menos, de interesse para o desenvolvimento científico e tecnológico do País.

ARTIGOS TÉCNICO-CIENTÍFICOS — Trabalho de investigação científica ou de aplicação tecnológica a um domínio bem definido da ciência ou da técnica e de que o autor seja um especialista.

NOTAS CIENTÍFICAS — Destinam-se essencialmente à apresentação de novos resultados no domínio da investigação científica ou do desenvolvimento tecnológico. Pretende-se uma nota curta, realçando os resultados alcançados e referenciando convenientemente trabalhos afins, evitando a exposição longa de antecedentes, que deverá ser remetida para referências.

3. Os artigos por convite e os artigos técnico-científicos, deverão ser escritos em língua portuguesa. As notas científicas poderão ser escritas em língua estrangeira, de preferência em inglês.

4. Os autores deverão atender na elaboração dos artigos às seguintes condições:

— os artigos convidados não poderão exceder 30 páginas dactilografadas, incluindo o espaço reservado a ilustrações;
— os artigos técnico-científicos não poderão exceder 15 páginas dactilografadas, incluindo o espaço reservado a ilustrações;
— as notas científicas não poderão exceder 8 páginas dactilografadas.

5. Os trabalhos devem ser dactilografados a dois espaços, em folhas modelo A4, devidamente numeradas.

6. Os trabalhos devem ser enviados em duplicado, recomendando-se aos autores que conservem uma cópia.

7. Conjuntamente com o trabalho, devem ser enviados:

— título do trabalho em português e inglês;
— resumo e abstract;
— nome, direcção e telefone do autor e demais dados que facilitem o processo de revisão de provas.

8. Os autores deverão assegurar-se, antes de enviarem os originais, que estes não contenham erros, falta de dados, etc., pois que, na fase de revisão de provas, apenas se corrigirão erros de composição tipográfica.

9. As referências bibliográficas serão indicadas no texto por ordem numérica, usando algarismos árabes entre colchetes, e a lista das mesmas, no final do artigo, obedecerá às seguintes normas:

Artigos de revistas: nome(es) do autor(es) e iniciais nome da revista, número do volume, página e ano, entre parêntesis. O título do artigo só deverá ser mencionado se isso constituir matéria fundamental para esclarecimento.

Livros: nome do autor e iniciais, título, editora, ano de publicação e páginas.

10. Os Quadros ou Tabelas, numerados em romano, devem figurar no texto datilografado, podendo ser encimados por um título conciso.

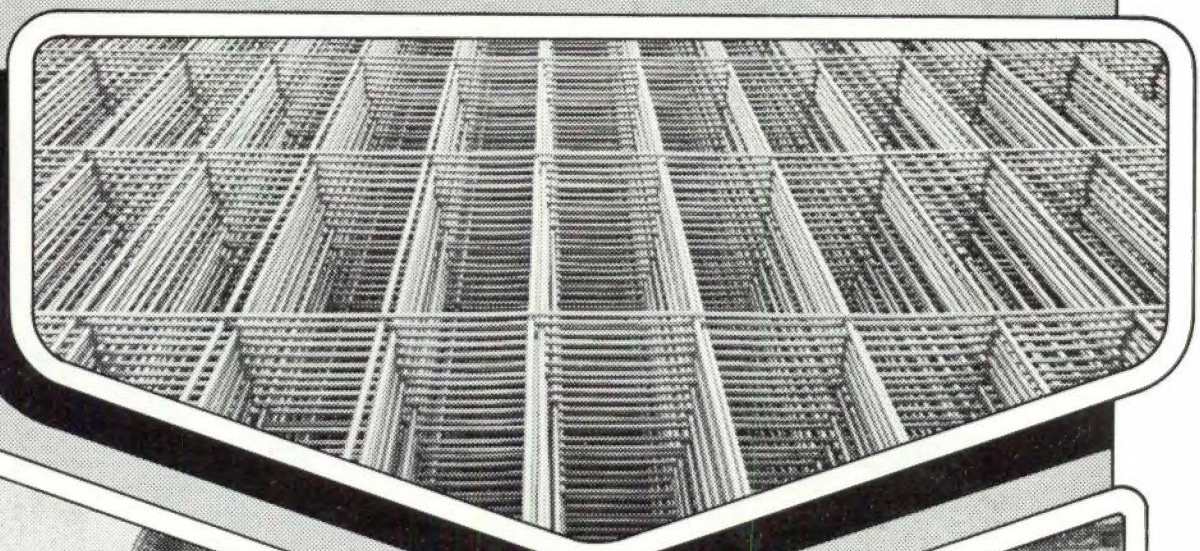
11. Os gráficos devem ser desenhados a tinta da china, em folhas separadas e prontos para serem reproduzidos. Quaisquer letras ou algarismos que neles figurem, deverão ser suficientemente grandes para permitir a sua redução que, em princípio, fica ao critério do editor.
As folhas com os gráficos, figuras ou fotografias, serão numeradas, indicando-se o trabalho a que dizem respeito. Além disso, no texto, indicar-se-à o local para a respectiva inclusão.

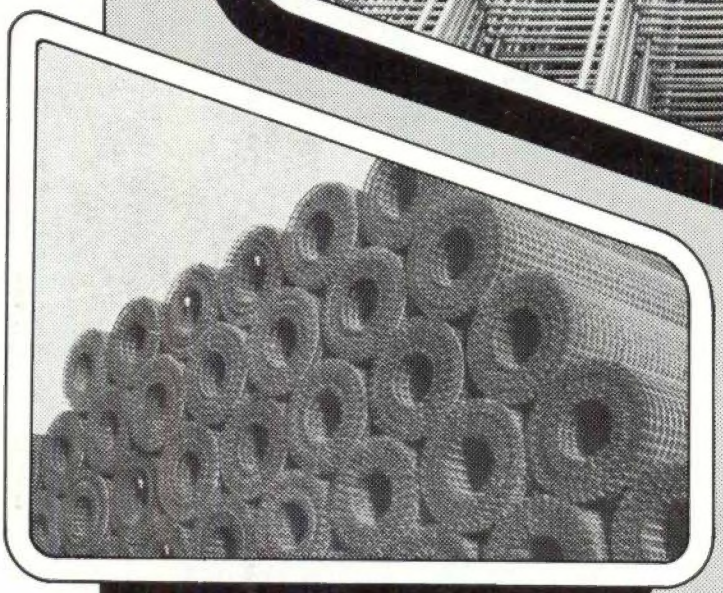
NOTA: *A TÉCNICA salienta a necessidade de os autores, quando for o caso, obterem em tempo as devidas autorizações de reprodução de excertos de outras obras, sendo esta matéria da inteira responsabilidade do autor.*

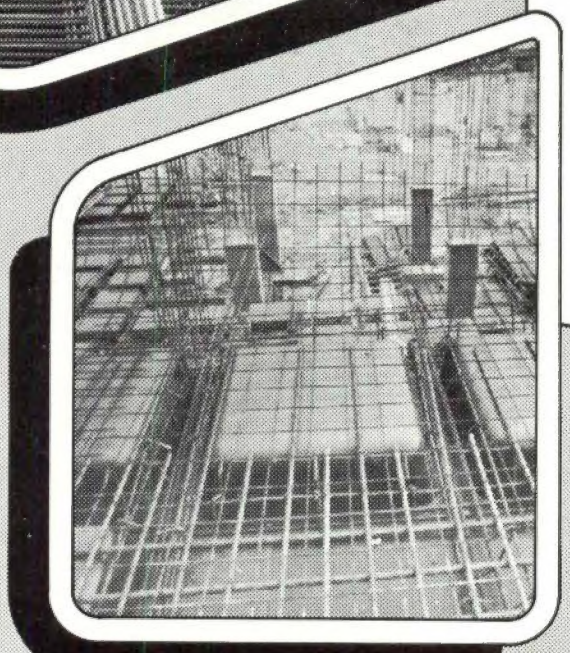
A TÉCNICA procurará, sempre que possível e por princípio, o parecer de individualidades de reconhecida competência técnico-científica, no sentido de apurar da originalidade, qualidade e interesse científico dos trabalhos que lhe são enviados. Esta atitude não se aplica aos artigos convidados, a menos que os autores o desejem. À Direcção da TÉCNICA, caberá sempre a ceitação ou recusa dos originais que lhe sejam enviados. A TÉCNICA notificará os autores ou devolverá os trabalhos submetidos a apreciação num prazo máximo de 90 dias após a recepção do original. Os trabalhos publicados, serão registados com a data de recepção do original na TÉCNICA e disso se dará pública notícia em respectiva nota de fim de página.

A TÉCNICA oferecerá cinco exemplares da Revista, por cada trabalho publicado, independentemente do número de autores.

COMPANHIA PORTUGUESA DE TREFILARIA







Qualidade na diversidade

Fabricamos uma variada e completa gama de arames de grande qualidade tanto nas características como nos acabamentos. Existimos para satisfazer as exigências de outras indústrias: construção civil, metalomecânica, mobiliário. Estamos também ao serviço da agro-pecuária. Desde 1947 que os arames são a razão de sermos indústria.

A qualidade é a nossa vocação!

Companhia Portuguesa de Trefilaria, S.A.R.L.
Lezíria do Saldanha · 2686 SACAVÉM CODEX
Portugal · Tel. 251 92 99 · Telex 12 623 TREFIL P
Teleg. TREFILARIAS - SACAVÉM
FÁBRICA DE CARVALHOS
R. da Fábrica, 321 · Cavadinhas · 4415 CARVALHOS
Tel. 982 24 73 · Telex 24 160 C.P.T.NOR

SIEMENS

Projectar e montar sistematicamente com "Sistema N"

Por que razão aparelhos para montagem encastrada, tais como, disjuntores, interruptores de corrente de defeito, interruptores e... e..., deverão continuar a ter profundidades de encastramento diferentes e aspectos distintos? Qual o motivo por que os aparelhos para montagem encastrada e os quadros de distribuição não se hão-de adaptar mutuamente? O Sistema N é a resposta a estas perguntas. O Sistema N – um vasto programa de aparelhos para encastrar e de quadros de distribuição num design uniforme –. Sistema N – aparelhos para encastrar e quadros de distribuição com profundidade de encastramento muito reduzida – montagem encastrada com economia de espaço, de fácil combinação e de montagem simples. Um Sistema Universal, adaptável e seguro – o Sistema N.

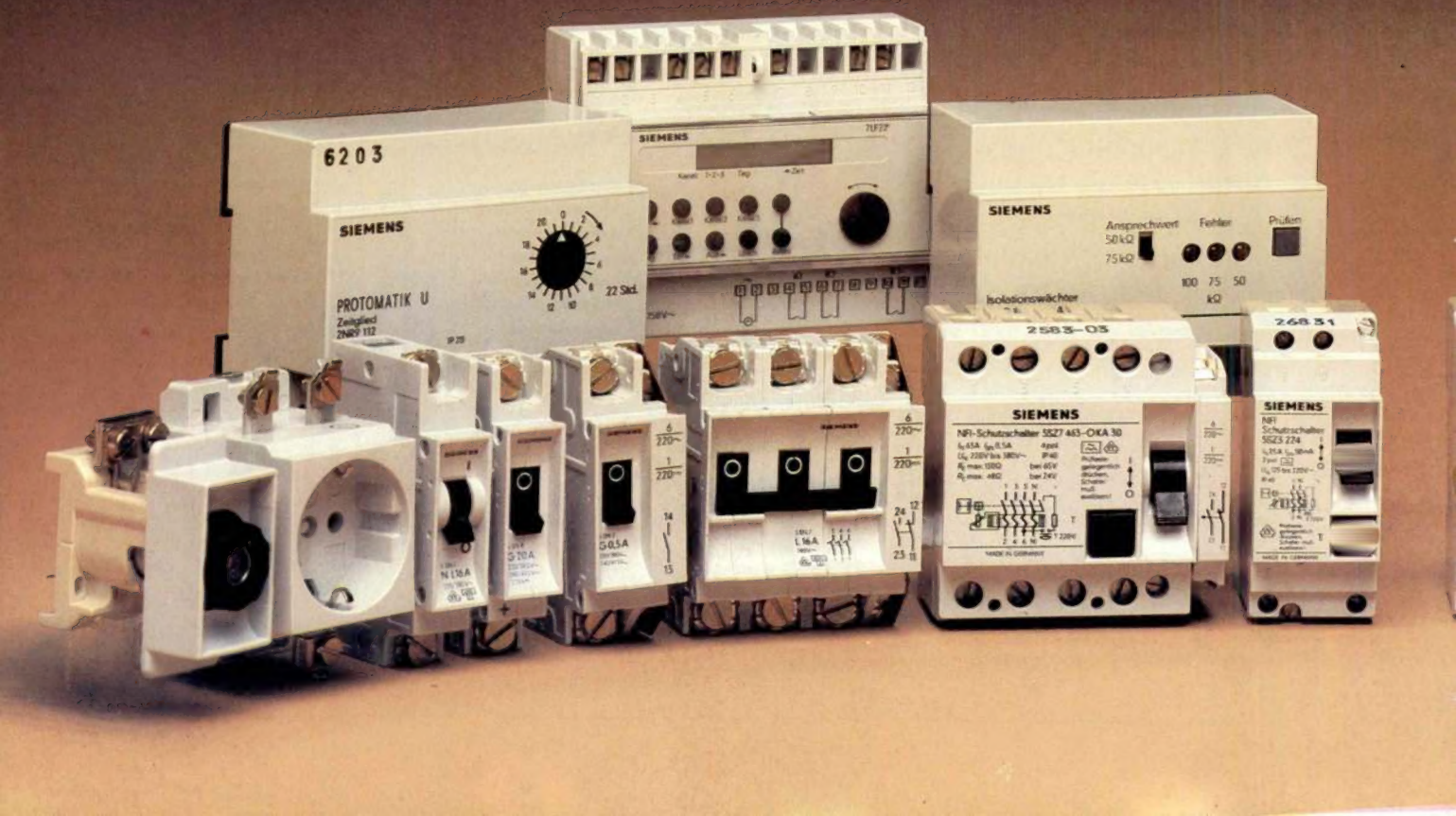
O PROGRAMA

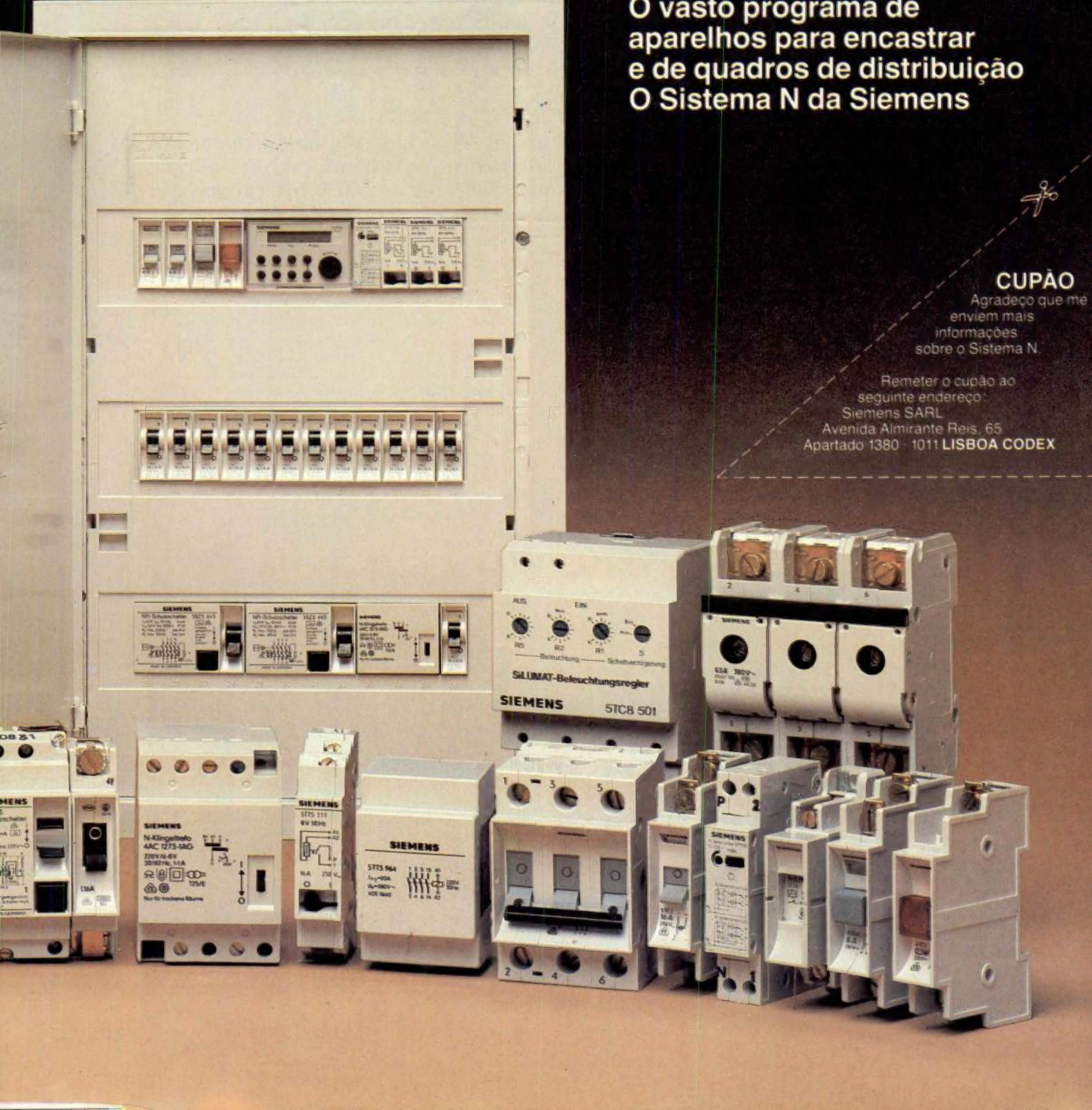
Aparelhos de encastrar N

Disjuntores, interruptores de corrente de defeito, interruptores, sinalizadores, tomadas Schuko, interruptores temporizados, interruptores para comando a distância, interruptores horários, reguladores de iluminação.

Quadros de Distribuição N

Quadros de distribuição para montagem encastrada e montagem saliente.




O vasto programa de
aparelhos para encastrar
e de quadros de distribuição
O Sistema N da Siemens
CUPÃO
Agradeço que me
enviem mais
informações
sobre o Sistema N.
Remeter o cupão ao
seguinte endereço:
Siemens SARL
Avenida Almirante Reis, 65
Apartado 1380 · 1011 LISBOA CODEX
SILUMAT-Beleuchtungsregler
SIEMENS
5TCB 501
SIEMENS

EDITORIAL

As preocupações expressas nos nossos editoriais ainda se mantêm.

A TÉCNICA continua a enfrentar limitações de ordem material que têm impedido a regularidade de publicação que se pretende e que, estamos, certos, se atingirá.

Este facto levou-nos a condensar numa única tiragem os 3.º e 4.º números de 1984 e a meditar sobre métodos e formas a adoptar em futuras edições.

No que respeita a original cumpre-nos registar a resposta positiva às nossas solicitações. Contudo, o que nos têm enviado é extenso e vai além das normas que a revista fixou. Sobre esta matéria não podemos deixar de salientar o preço por página exigido por algumas revistas estrangeiras. Por outro lado, e no que respeita a notas científicas nada se tem recebido.

Tudo leva a crer que as dificuldades materiais sejam superadas mas o que se nos escapa é a existência de um número elevado e rico de notas científicas que é um dos aspectos mais importantes, não só no que respeita à projecção da revista mas também da imagem que dá da comunidade que serve.

M. de ABREU FARO

Homenagem ao Professor Ferreira de Macedo

Estão em curso diligências no sentido de ser prestada homenagem ao Professor António Augusto FERREIRA DE MACEDO, que foi notável professor do Instituto Superior Técnico, de 1927 a 1947, onde ensinou, magistralmente, Matemáticas Gerais e Geometria Descritiva, cadeiras básicas comuns a todos os cursos ministrados no IST.

A Câmara Municipal de Lisboa dará todo o apoio às Homenagens, e está disposta a implantar um monumento em sua memória numa Praça de Lisboa, local que, quando o monumento lá estiver e for inaugurado, passará a chamar-se PRAÇA PROFESSOR FERREIRA DE MACEDO.

Os fundos para a concretização de tal monumento serão obtidos por **subscrição pública,** para a qual contribuirão, espera-se, todos quantos, como alunos ou amigos, tiveram o privilégio de contactar ou conhecer tão excelsa figura de MESTRE e CIDADÃO.

As eventuais contribuições monetárias, que antecipadamente se agradecem, devem ser concretizadas por transferência bancária para a "conta" HOMENAGEM AO **PROF. FERREIRA DE MACEDO,** com o n.º 1685872/000/001/009, expressamente aberta no BANCO FONSECAS & BURNAY, Dependência Urbana, Av. Fontes Pereira de Melo, 4, em Lisboa.

Eventuais pedidos de esclarecimento ou sugestões, podem ser dirigidos para:

"Comissão de Homenagem ao Prof. Ferreira de Macedo"
Av. Estados Unidos da América, 82-3.º Esq. — 1700 LISBOA

Professor Pedro Luis Borges Teixeira Por ocasião do primeiro aniversário do seu falecimento

O Prof. Borges Teixeira nasceu no dia 5 de Janeiro de 1941 e faleceu em 16 de Fevereiro de 1984.
Pelo seu valor intrínseco, pelo modo como generosamente pôs as suas altas qualidades ao serviço do Instituto Superior Técnico, com independência da tristeza e palavras de convenção que sempre se motivam numa vida curta, subitamente interrompida em pleno brilho, o Departamento de Engenharia Electrotécnica e de Computadores deliberou desde logo assinalar a obra do Prof. Borges Teixeira.

Aliou-se a Técnica a esse propósito.

Acontece que neste momento a Direcção da Revista recai sobre mim. Assim, em relação à justa homenagem que esta Revista presta ao Prof. Borges Teixeira, não posso deixar de acrescentar um pouco mais, consubstanciado no facto de ter sido seu professor, de termos colaborado, de nos ligar uma amizade muito grande e antiga.
Sentimentos desta natureza não se constroem no abstracto ou em inexplicável emotividade mas radicam-se, isso sim, em afinidades de ideal universitário.
Não me compete julgar no pormenor, disso se ocupou em excelente artigo a Secção de Electrónica do nosso departamento.
Uma última nota científica do Prof. Borges Teixeira, também publicada neste número, dá exemplo e notícia do seu modo próprio de analisar uma ciência que especialmente cultivou: a Electrónica.
A par de uma sensibilidade e dotes de artista, o Prof. Borges Teixeira possuía uma inteligência lúcida e profunda, uma capacidade raríssima de aliar a prática eficiente do Engenheiro com uma teoria que dominava bem e pairava alto.
Passou de modo efémero pela Indústria e nesse trânsito aproveitou o melhor.
Estudioso incansável, possuidor de uma cultura universal, um sorriso permanente de disponibilidade acrescido, por vezes, com uma ironia sem mal que ainda era inteligência e aviso consagrou-se totalmente ao Técnico, deu-se integralmente à Escola.
Desligado de interesses materiais, no espírito mais puro de um universitário, viveu nesse ideal e receava por esse ideal.

M. ABREU FARO
Fev. 85

técnica

tabela de publicidade 1985

TABELA DE PUBLICIDADE — 1985		Esc.:
	1 página	1/2 página
verso de capa e verso de contra-capa	25 000$	—
contra capa	30 000$	—
qualquer outra página	20 000$	12 500$
PUBLICIDADE EM QUADRICOMIA		
verso de capa e verso de contra-capa	35 000$	25 000$
contra capa	40 000$	—
qualquer outra página	30 000$	20 000$

ENCARTES: Por cada folha A_4 Esc.: 15 000$ (papel e impressão do cliente)

PUBLICAÇÃO: Trimestral • TIRAGEM: 5 000 exemplares • LÍNGUAS USADAS NA REVISTA: Português, Inglês e Francês • TIPO DE LEITORES: Professores, investigadores, profissionais e estudantes de Engenharia e Ciências Básicas de Engenharia • IMPRESSÃO EM OFFSET: Formato 210x297 mm • ÁREA DE IMPRESSÃO 170x260 mm • NÚMERO USUAL DE PÁGINAS: 64 • Os anúncios são pagos após a publicação.

ADVERTISEMENT RATES — 1985		US$
	1 page	1/2 page
2nd & 3rd cover	190.	—
4th cover	250.	—
any other page	150.	95.
COLOUR ADVERTISEMENTS		
2nd & 3rd cover	250.	—
4th cover	310.	—
any other page	220.	—

INSERTS: For each sheet A_4 (297x210 mm) the price of one page

CIRCULATION: 5 000 • FREQUENCY: quarterly • LANGUAGES USED IN OUR JOURNAL: Portuguese, English and French • TYPE OF READERSHIP: Professors, researchers, professionals and students of Engineering and Basis Sciences of Engineering • PRINTING PROCESS: offset • TYPE AREA: 170x260 mm • USUAL NUMBER OF PAGES: 64 • Advertisements are paid after publication • Agent comission: 20%.

técnica

Revista de Engenharia

Publicação da Associação dos Estudantes do Instituto Superior Técnico

ESPECTROMETRIA DE PERDA DE ENERGIA DE ELECTRÕES

J. LOPES DA SILVA

Centro de Química Física Molecular da Universidade Técnica de Lisboa.
Complexo I do INIC. Instituto Superior Técnico — Lisboa

RESUMO

Neste trabalho abordam-se aspectos teóricos da interacção electrão-alvo relevantes para a compreensão das características da espectrocospia de perda de energia de electrões, nomeadamente no que se relaciona com a observação de transições electrónicas e vibracionais opticamente interditas. São referidos diferentes tipos de dispositivos experimentais descritos na literatura e apresentam-se alguns espectros servindo de exemplo das potencialidales da técnica.

ABSTRACT

A brief review is given of the status of energy electron loss spectroscopy. The article discusses the physics of electron impact concerning the vibrational and electronic molecular excitations. Special attention to optical forbiden transitions is given. Different types of spectrometers are described. Some spectre are presented which points out the potentialities of the technique.

1 — INTRODUÇÃO

Designa-se por espectrometria de electrões todo um conjunto de técnicas baseadas na análise da energia cinética de electrões emitidos por uma amostra. Consoante o tipo de radiação primária, ela pode tomar várias designações. Delas destacamos a espectroscopia do fotoelectrão e a de perda de energia de electrões.

Na espectroscopia do fotoelectrão, o alvo é submetido a um feixe de radiação electromagnética, em geral raiosX ou radiação ultravioleta. Não nos referiremos a ela neste trabalho, pois, por si só, constituiria tema para um longo artigo de revisão. Encaminhamos o leitor para as referências [1-5] como exemplo de trabalhos publicados susceptíveis de lhe dar uma ideia do seu desenvolvimento.

A espectroscopia por impacte de electrões, cuja abordagem constitui o objectivo deste trabalho, baseia-se na medida da energia perdida por electrões monocinéticos nos diferentes processos de colisão em que intervêm.

Os primeiros trabalhos no domínio da difusão de electrões reportam-se ao início do século [6]. No entanto, foi só nos últimos vinte anos que esta técnica sofreu uma evolução apreciável. Isto foi devido ao desenvolvimento de novos métodos de selecção em energia na produção de electrões monocinéticos, ao aumento da precisão dos detectores e analisadores de partículas com carga eléctrica e ao incremento de novos métodos computacionais de aquisição e tratamento de dados. O interesse crescente por esta espectroscopia está igualmente associado às perspectivas que oferece no estudo de numerosos processos atómicos ou moleculares, pouco acessíveis pela espectroscopia óptica. É o caso da observação de transições opticamente interditas, estados acima do nível de vácuo, nomeadamente os plasmões e ainda estados de iões negativos. Para além do apoio que fornece à caracterização estrutural dos átomos e/ou moléculas, é possível assinalar vários exemplos de aplicação em problemas concretos, como no domínio da identificação de substâncias.

Na figura 1 está representado esquematicamente um tipo de espectro de electrões rectrodifundidos por uma superfície sólida [7]. Nele podemos distinguir três regiões: A região *A* contém um pico de perda nula, que corresponde à detecção de electrões difundidos elasticamente (é o pico elástico); a zona *B* recolhe as

Original recebido para publicação em 29/9/84.

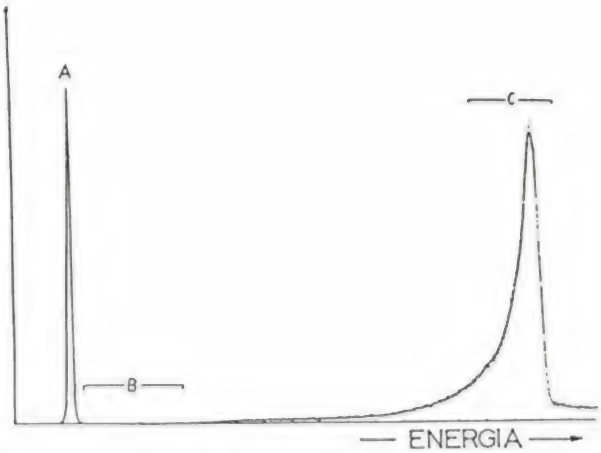


Fig. 1: Espectro típico de electrões rectrodifundidos por uma uma superfície sólida: A — electrões difundidos elasticamente (pico elástico), B — Zona de perda de energia, C — electrões secundários lentos ou secundários verdadeiros.

contribuições dos electrões que estiveram na origem de excitações electrónicas, vibracionais e rotacionais das moléculas do meio irradiado; finalmente a parte *C* refere-se aos electrões secundários lentos ou secundários verdadeiros. Em certos casos, é possível evidenciar nesta última região uma estrutura atribuível à emissão de electrões, por autoionização ou por efeito Auger. A análise da energia de electrões com esta origem constitui, aliás, a base de outras duas formas de espectroscopia de electrões: Auger e de Autoionização [3,8].

Neste artigo vamos incidir particularmente a nossa atenção sobre a zona B do espectro. A revisão que faremos começará por abordar aspectos teóricos das colisões inelásticas electrão-molécula e que permitem evidenciar as possibilidades de estudo que a técnica oferece. Depois de sintetizarmos algumas formas de concretizar experimentalmente a espectroscopia de perda de energia, apresentaremos alguns espectros obtidos por vários autores. Finalizaremos o artigo com a indicação de aplicações possíveis da técnica no domínio da Química e da Física.

2 — ASPECTOS TEÓRICOS DA ESPECTROCOPIA DE PERDA DE ENERGIA DE ELECTRÕES

Um estudo teórico da espectroscopia por impacte de electrões, terá que abordar necessariamente, o problema da difusão inelástica de electrões por moléculas do meio irradiado. Tal abordagem é usualmente realizada separando o caso em que a energia dos electrões incidentes é suficientemente elevada de forma a que a sua velocidade seja muito superior à dos electrões K do meio ($v \gg Z e^2/h$), daquele em que esta desigualdade não se verifica. Na primeira situação é possível considerar a colisão como rápida e não ressonante: o electrão primário actua como uma perturbação impulsiva do sistema alvo que responde como se fosse um sistema isolado. No segundo, o electrão incidente pode ser fortemente acoplado ao alvo e torna-se indiscernível dos electrões orbitais.

Neste parágrafo vamos portanto separar estes dois tipos de interacções (colisões rápidas e colisões lentas) com o objectivo de prever a natureza das transições electrónicas produzidas por cada uma delas. As excitações de estados vibracionais serão igualmente tratadas.

2.1 — Excitações electrónicas por difusão inelástica

2.1.1 — *Colisões rápidas*

A teoria da difusão inelástica de electrões por átomos foi elaborada por Bethe [9] no domínio da validade da aproximação de Born ($v \gg Z e^2/h$). Ela foi retomada por Lassetre [10], Brongersma [11] e Inokuti [12]. Citamos igualmente os livros de Massey [13] e de Bonham [14] bem como o artigo de revisão de Celotta e Huebner [15].

De acordo com a teoria de Bethe, a secção eficaz de uma colisão levar um átomo do seu estado fundamental (função de onda Ψ_o) a um nível discreto caracterizado por uma energia de excitação E_n (função de onda Ψ_n) é dada por:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4\, a_o^2 \frac{K_f}{K_i}\, q^{-4} \left(\varepsilon_n \right)^2 \qquad (1)$$

Nesta expressão $a_o = (\Psi/m\, e)^2$, em que m e e são respectivamente a massa e a carga do electrão e Ω é o ângulo sólido. O vector de transferência de momento é definido por

$$\vec{q} = \vec{K}_i - \vec{K}_f \qquad (2)$$

e $K_i = |\vec{K}_i|$ e $K_f = |\vec{K}_f|$ são respectivamente os vectores de onda de momento inicial e final. A quantidade $|\varepsilon_n|$ representa, por sua vez, o valor absoluto do elemento de matriz de posição entre as funções de onda do estado inicial e final:

$$\varepsilon_n = < \Psi_n \,|\, \sum_{j=1}^{Z} \exp\,(i\, q\, r_j) \,|\, \Psi_o > \qquad (3)$$

sendo Z o número total de electrões da malécula e r_j o vector de posição do electrão j do alvo. Tendo pre-

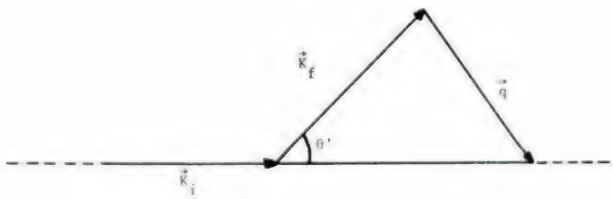


Fig. 2: Representação esquemática definindo a orientação dos vectores de onda $\vec{K}_i$ e $\vec{K}_f$ e transferência de momento $\vec{q}$.

sente a orientação relativa dos vectores $\vec{K}_i$, $\vec{K}_f$ e $\vec{q}$ esquematizada na figura 2, é possível chegar a

$$q^2 = K_i^2 + K_f^2 - 2\ K_i\ K_f \cos \Theta' \qquad (4)$$

Por analogia com a teoria da absorção da radiação electromagnética, Bethe introduziu o conceito de força de oscilador generalizada (f.o.g.) o qual obedece à regra da soma $\sum_n f_n = Z$ e se define pela expressão

$$f_n = \frac{E_n}{R}\ (q\ a_o)^{-2} \left(\varepsilon_n \right)^2 \qquad (5)$$

Sendo $R = 13{,}605826$ eV e $a_o = 5{,}2917715\ .\ 10^{-11}$ m.

Tendo em conta a equação 5, a expressão da secção eficaz diferencial toma a forma

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4\ a_o^2\ \frac{K_f}{K_i} \left[\frac{1}{(q\ a_o)^2} \right] \frac{f_n}{E_n/R} \qquad (6)$$

A secção eficaz diferencial depende portanto, simultaneamente, das características do alvo, através de f_n/E_n, e da partícula incidente pelo factor $K_f/K_i\ q^2$.

Para o objectivo do presente trabalho, interessa-nos considerar aqui o caso particular das «colisões rápidas» acompanhadas de uma transferência de momento pequena. Neste caso o ângulo de difusão é reduzido, o que permite substituir 4 por

$$q^2 \approx (K_i - K_f)^2 + (K_i\ \Theta')^2 \qquad (7)$$

ou, fazendo intervir em vez dos momentos, a energia cinética E_i, do electrão incidente e a energia de excitação da molécula alvo E_n,

$$q^2 \approx \frac{2\ m\ E_i}{n^2} \left(\Theta'^2 + \frac{E_n^2}{4\ E_i^2} \right) = \frac{1}{a_o^2}\ \frac{E_i}{R}$$

$$\left[\Theta'^2 + \left(\frac{E_n}{2\ E_i} \right)^2 \right] \qquad (8)$$

Por sua vez, sendo $K_i - K_f$ muito pequeno ($K_i \approx K_f$), a equação 6 passa e ter a forma

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx 4\ \frac{R}{R}\ \frac{f_n}{f_n} \qquad (9)$$

Substituindo 8 em 9 obtém-se

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx 4\ a_o\ \frac{R^2}{E_i}\ \frac{f_n}{E_n}\ \frac{1}{\Theta'^2 + (E_n/2\ E_i)^2} \qquad (10)$$

No limite quando Θ' tende para zero, a secção eficaz diferencial $(d\sigma/d\Omega)_o$ é dada por

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_o \approx 16\ a_o^2\ R^2\ \frac{f_n}{E_n^3}\ E_i \qquad (11)$$

mostrando que a probabilidade de excitação de um nível de energia E_n depende da razão f_n/E_n^3 em condições de pequena transferência de momento e de ângulo Θ próximo da difusão rasante.

Se a transição $\Psi_n \leftarrow \Psi_o$ for opticamente permitida, pode demonstrar-se que a f.o.g. se reduz à f.o. óptica. Assim, o desenvolvimento em série do operador que figura na expressão 3 conduz a

$$\varepsilon_n = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(i\ q\ a_o)^m}{m!} < \Psi_f \left| \sum_{j=1}^{Z} \left(\frac{r_j}{a_o}\ .\ \hat{q} \right)^m \right| \Psi_o > =$$

$$= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(i\ q\ a_o)^m}{m!}\ \varepsilon_{n,1m} \qquad (12)$$

sendo $\hat{q}$ um vector unitário com a direcção $\vec{q}$. Substituindo 12 em 5 verifica-se que

$$\lim_{q \to o} f_n = \frac{E_n}{R} \left| \varepsilon_{n,1} \right|^2 = f_n^o \qquad (13)$$

Nas condições limite definidas, a expressão 11 passa a escrever-se em função da força de oscilador óptica f_n:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_o \approx 16\ a_o\ R^2\ \frac{f_n}{E^3}\ E_i \qquad (14)$$

Podemos pois concluir que as transições electrónicas, produzidas por electrões rápidos em colisões inelásticas de pequena transferência de momento, devem obedecer às regras de selecção ópticas. Diz-se então que nos encontramos nas condições de validade da «aproximação óptica».

Se a transição $\Psi_n \leftarrow \Psi_o$ for opticamente proibida é necessário tomar em consideração, no desenvolvimento 12, termos de ordem superior e explicar, deste modo, valores não nulos da força de oscilador.

Em face do exposto podemos portanto concluir que um espectro de perda de energia de electrões rápi-

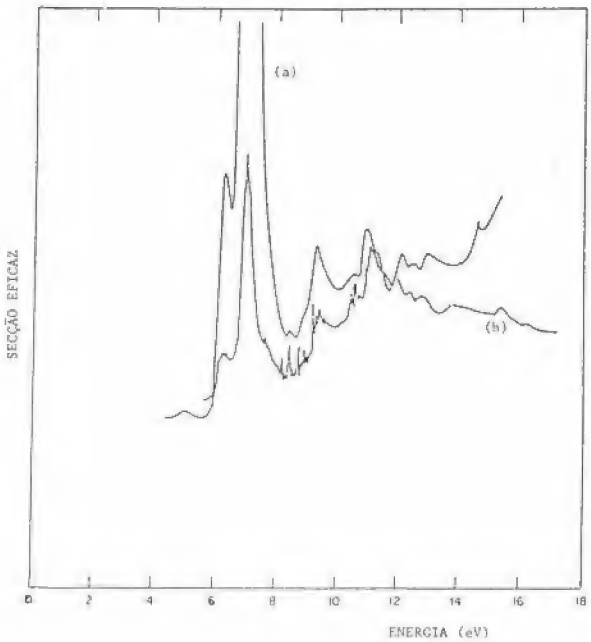


Fig. 3: (a) Espectro de perda de energia de electrões de 300 eV em benzeno (b) Espectro de absorção no U. V. do benzeno (Reprodução de [27]).

dos, obtido segundo ângulos de difusão pequenos, deve coincidir, em termos de probabilidades relativas das diferentes excitações moleculares, com o espectro de absorção óptico. É o que se pode constatar na fig. 3, onde se representa um espectro do benzeno obtido com um feixe de electrões de 300 eV e segundo um ângulo de difusão razante [16] e um espectro de absorção no U. V. [17].

As expressões aplicáveis a transições entre estados discretos são facilmente modificáveis para transições para um estado final contínuo, substituindo em 9 σ por $d\sigma/dE$ e f_n por df/dE.

A probabilidade de excitação produzida por um electrão rápido em meios condensados é usualmente expressa em termos da constante dieléctrica, ε, do meio. Tal procedimento fundamenta-se no facto da variação da parte imaginária de ε, em função da frequência de excitação, apresentar uma estrutura que corresponde a pontos críticos nas transições de banda. Assim, na expressão da secção eficaz de excitação referente a uma transferência de energia $E_n = \hbar\omega$, o produto $(1/_n)$ df/dE escreve-se na forma [18]:

$$\frac{1}{\hbar\omega}\,\frac{df}{d(n\omega)} = \frac{m}{2\pi^2\ e^2\ h^2{}_N}\ \mathrm{Im}\left(-\frac{1}{\varepsilon}\right) \qquad (15)$$

sendo Im $(-1/\varepsilon)$ a função de perda de energia definida por

$$\mathrm{Im}\left(-\frac{1}{\varepsilon}\right) = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} \qquad (16)$$

em que N é o número total de moléculas do meio irradiado, por unidade de volume e ε_1 e ε_2 representam, respectivamente, a parte real e imaginária da constante dieléctrica do meio. A abundância relativa de um estado dotado de uma energia de excitação $\hbar\omega$ é portanto definida pela «função de perda», pelo que uma vez conhecidos os valores de ε_1 e ε_2 podemos recolher informações sobre a natureza das excitações primárias.

A determinação de ε_1 e ε_2 pode ser feita a partir de medidas de reflectância de fotões [19, 20]. É o caso dos valores calculados para o poliestireno e representados, na parte a, da figura 4, em função da energia de excitação [19]. A função de perda obtida a partir dos dados anteriores e indicada na figura 4b pode ser

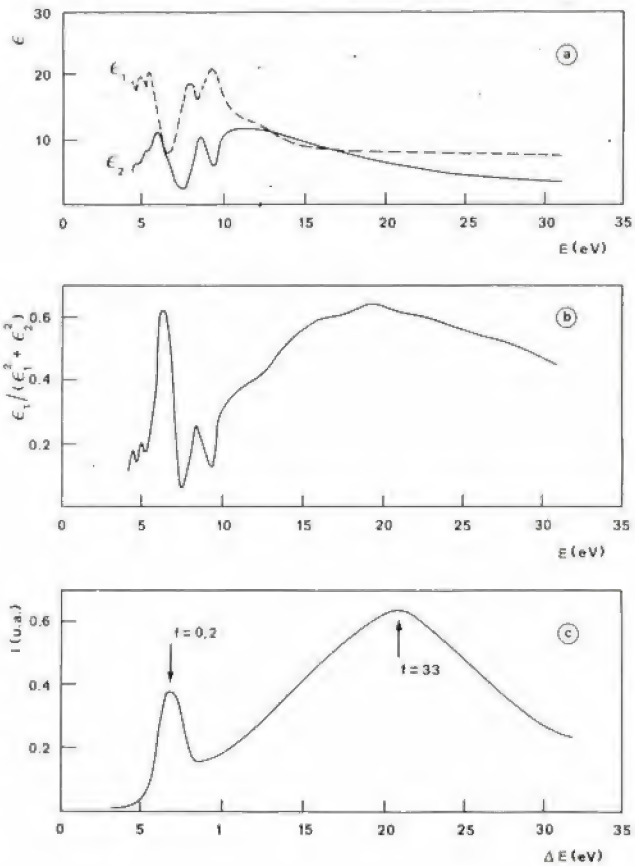


Fig. 4: (a) Valores experimentais de ε_1 e ε_2 do poliestireno obtidos por reflectividade em função da energia dos fotões [19], (b) Função de perda do poliestireno [20], (c) Espectro de perda de energia de electrões de 20 KeV difundidos em poliestireno [21].

comparada com um espectro de perda de energia de electrões rápidos em poliestireno [21], indicado na parte c, da figura 4. Verifica-se deste modo que a função de perda indica bem a probabilidade de excitação.

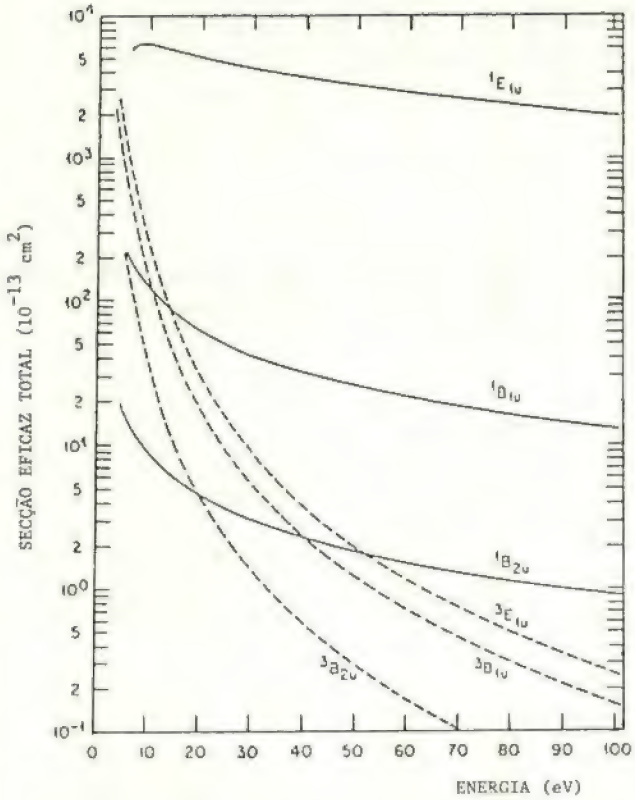


Fig. 5: Secção eficaz total de excitação de níveis moleculares do benzeno calculada segundo o modelo de Ochkur-Rudge (Reprodução de [27]).

Os métodos ópticos de obter a constante dieléctrica encontram, no entanto, algumas ificuldades experimentais, relacionadas, por exemplo, com o facto da reflectividade ser muito sensível ao estado da superfície, especialmente para radiações de baixo comprimento de onda (u.v. longíquo). Vários autores, baseados na possibilidade do espectro de perda de energia pode ser descrito pela teoria dieléctrica, têm procedido de forma inversa, isto é, determinando constantes ópticas a partir da análise dos espectros. Exemplos de tratamentos deste tipo, utilizando a expressão da dispersão de Kramers-Kroning são considerados nas referências [22-26] para substâncias orgânicas e inorgânicas.

2.1.2 — *Difusão inelástica de electrões lentos*

Se a velocidade dos electrões incidentes for vizinha ou inferior à dos electrões orbitrais, a aproximação de Born deixa de aplicar-se no estudo da difusão inelástica. A solução do problema teórico torna-se então mais complicada, pois é necessário considerar fenómenos ignoráveis nas «colisões rápidas»: processos de troca de electrões, polarização dos átomos em moléculas do alvo, distorção por estes últimos da onda plana associada ao electrão...

Uma primeira extensão da aproximação de Born é a de Born-Oppenheimer na qual a função de onda, $\Psi(r_1, r_2)$ que caracteriza o sistema de dois electrões (incidente e difusor) é a função produto antissimétrico [27]:

$$\Psi^{\pm}(r_1, r_2) = N\,[e^{i K_i r_2}\,\Psi_1(r_1) \pm \pm e^{i K_i r_1}\,\Psi_1(r_2)]\,\eta \qquad (17)$$

Nesta expressão η é a função de spin simétrica ou antissimétrica apropriada, N uma constante de normalização, r_1 e r_2 definem as posições dos electrões do meio e incidente, $\Psi_1(r_1)$ é a função de onda do electrão do alvo, enquanto que $e^{i K_i r_2}$ é a do electrão incidente. A amplitude de difusão inelástica é dada, neste caso, por

$$g_n^{\pm}(\Theta) = -\frac{2_m}{4\pi n^2}\iint e^{iqr_2}\,\Psi_n^{*}\,|\,(r_1)\left[\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_2}\right]\Psi_1(r_1)\,dr_1 dr_2 \iint e^{i}(K_i r_1 - K_f r_2)\,\Psi_n^{*}(r_1)\left[\frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_1}\right]\Psi_1(r_1)\,dr_1 dr_2 \qquad (18)$$

em que o sinal + se refere à excitação de um estado singuleto e o sinal − à de um nível tripleto. O primeiro termo da expressão corresponde à amplitude de difusão de Born e o segundo à difusão de troca. Este último, que explica o facto das amplitudes das transições opticamente proibidas não serem nulas, foi posteriormente reformulado por Ochkur [28, 29] e por Rudge [30, 31].

O tratamento de Ochkur-Rudge serviu de base a Matsuzawa [32] e Christophorou [27] para determinarem secções eficazes de excitação do benzeno considerando-o como um sistema de 6 electrões π e um cor de electrões σ. Não apresentaremos neste artigo as expressões obtidas, dada a sua complexidade e as mesmas não serem necessárias para o nosso objectivo. Assim limitamo-nos a reproduzir na fig. 5 os valores valculados para os estados singuleto e tripleto do benzeno e apresentados na referência [27]. Constata-se

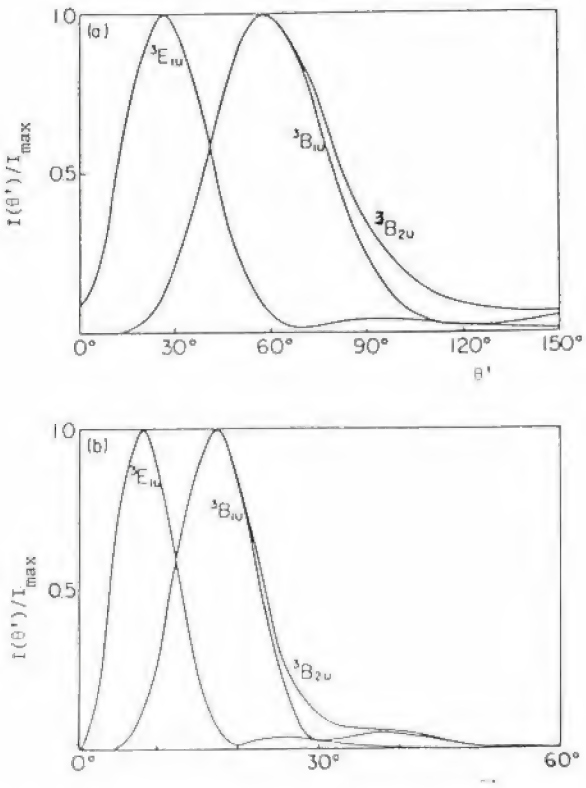


Fig. 6: Distribuição angular normalizada correspondente à excitação dos níveis $^3E_{1u}$ (T_2), $^3B_{1u}$ (T_1) e $^3B_{2u}$ (T_3). Energia incidente (a) 30 (eV) (b) 300 eV (Reprodução de [32]).

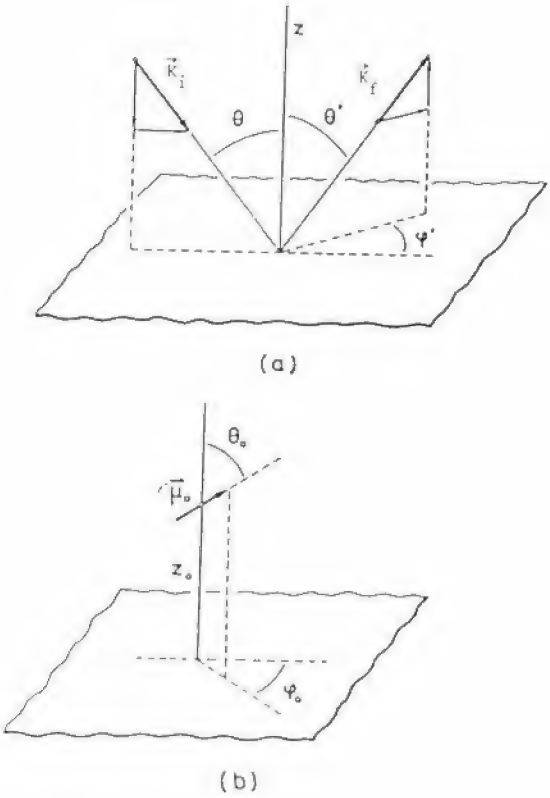


Fig. 7: (a) Geometria de difusão de um electrão (b) Orientação do momento dipolar associado com os osciladores adsorvidos. (Reprodução de [36]).

portanto, que a probabilidade das transições opticamente proibidas pode ter valores apreciáveis no caso de excitação por electrões lentos ($E_o < 50$ eV). Assinale-se que esta probabilidade, para além de depender da energia incidente é igualmente função do ângulo de difusão Θ, como se pode observar na fig. 6. As transições para o nível T_2 (mais prováveis entre os estados tripletos) são favorecidos para valores pequenos de Θ. Na tabela seguinte são indicadas probabilidades máximas das transições $^3B_{1u} \leftarrow {}^1A_g$, $^3E_{1u} \leftarrow {}^1A_g$ e $^3B_{2u} \leftarrow {}^1A_{1g}$ para vários valores da energia do electrão primário, com a indicação do ângulo de difusão a que se referem.

Estes resultados mostram a importância da espectroscopia de perda de energia de electrões lentos na observação de processos moleculares não revelados pela espectroscopia óptica.

TABELA

Valores máximos de secções eficazes de excitação dos estados $^3B_{1u}$, $^3E_{1u}$ e $^3B_{2u}$ do benzeno [32]

	$^3B_{1u} \leftarrow {}^1A_g$		$^3E_{1u} \leftarrow {}^1A_g$		$^3B_{2u} \leftarrow {}^1A_g$	
E_o (eV)	Θ_{max}	σ_{max}	Θ_{max}	σ_{max}	Θ_{max}	σ_{max}
10	131	0,223	49	0,861		
20	74	$7.82.10^{-2}$				
30	58	$3,93.10^{-2}$	27	0,184	59	$9,35.10^{-3}$
100	30	$4,13.10^{-3}$				
300	17	$4,78.10^{-4}$	8	$2,18.10^{-3}$	17	$1,07.10^{-4}$

2.2 — Excitações vibracionais por difusão inelástica

Na sua fase actual, a espectroscopia vibracional por difusão inelástica de electrões está sobretudo orientada para o estudo de moléculas ou átomos adsorvidos em superfícies metálicas. Os trabalhos teóricos prevêem para este caso dois tipos de mecanismos de interacção electrão-vibração: as interacções dipolares e as interecções ressonantes. No que se segue tomaremos como ponto de partida dois artigos de revisão de Bertolini [33] e Lopez [34].

2.2.1 — *Interacções dipolares*

Para distâncias entre o electrão incidente e uma molécula adsorvida elevadas, o electrão fica essencialmente submetido ao campo eléctrico criado pela distribuição de cargas formada pela molécula e pela carga de blindagem no substracto. A interacção sofrida pelo electrão é então de natureza dipolar [35, 36].

A geometria da difusão inelástica de um electrão por acção de um centro difusor está esquematizada na fig. 7a. Definem-se assim os vectores $\vec{K}_i$ e $\vec{K}_f$, bem como os ângulos Θ, Θ' e φ' que fixam as orientações dos vectores em relação à superfície e ao plano de incidência. Na parte b da mesma figura representa-se o vector momento dipolar $\vec{\mu}_o$ do dipolo associado às oscilações do meio adsorvido, situado a uma distância Z_o da superfície e com uma orientação definida pelos ângulos Θ_o e φ_o.

O sistema electrão-molécula-substracto pode ser definido por um hamiltoneano que para além da energia cinética do electrão difundido, do potencial devido à superfície metálica limpa e de um termo correspondente aos modos vibracionais moleculares, contém ainda o potencial, V, devido à interacção do electrão com os campos dipolares das moléculas adsorvidas [36]:

$$V = - e \left(\mu_p + s \left(\frac{d\mu}{ds}\right) \mu_o\right) \frac{r}{r^3} \qquad (19)$$

O primeiro termo nesta expressão provém do dipolo permanente e contribui só para a difusão elástica, sendo por isso desprezado. O segundo é devido ao dipolo oscilante na direcção de $\vec{\mu}_o$ e nele intervêm, a distância r do electrão ao centro de massa da molécula, s, uma coordenada normal de vibração e $(d\mu/ds)$ o momento dipolar dinâmico associado a esta coordenada.

Partindo da equação (19) é possível deduzir a seguinte expressão para a secção eficaz total de difusão inelástica [36]:

$$\sigma = \sqrt{\frac{E_i}{E_f} \frac{m}{M} \frac{e^2}{E_i \hbar\omega} \left(\frac{d\mu}{ds}\right)^2} \int f^2 \, d\Omega \qquad (20)$$

em que o factor fora do integral depende da energia incidente E_i e difundida E_f, das constantes do electrão (e e m) e das características do oscilador (massa reduzida M, energia $\hbar\omega$ e momento $d\mu/ds$). O integral é uma grandeza adimensional, função de E_f/E_i e do ângulo de incidência Θ, sendo

$$f = \frac{K_i}{2} \int \Psi^*_{K_f}(r) \frac{\mu_o r}{r^3} \Psi_{K_i}(r) \, d^3r \qquad (21)$$

a amplitude de difusão e Ω o ângulo sólido em torno da direcção especular.

No cálculo das secções eficazes é possível separar as amplitudes de difusão $f_\perp$ e $f_{//}$ associadas às projecções do momento dipolar respectivamente segundo uma direcção perpendicular e paralela à superfície [33]:

$$f_\perp = \frac{K_i}{q_{//}^2 + (K_{i_\perp} - K_{f_\perp})^2} \Big| \; q_{//} \, e^{-q_{//} Z_o} - 2(K_{i_\perp} - K_{f_\perp}) \operatorname{sen} (K_{i_\perp} - K_{f_\perp}) Z_o \Big| - \frac{K_i}{q^2 + (K_{i_\perp} + K_{f_\perp})^2} \Big| \; q_{//} \, e^{-q_{//} Z_o} - 2(K_{i_\perp} + K_{f_\perp}) \operatorname{sen} (K_{i_\perp} - K_{f_\perp}) Z_o \Big| \qquad (22)$$

$$f_{//} = i \frac{K_i \, q_{//}}{q_{//}^2 + (K_{i_\perp} - K_{f_\perp})^2} \Big| \; e^{-q_{//} Z_o} + 2 \cos(K_{i_\perp} - K_{f_\perp}) Z_o \Big| - i \frac{K_i \, q_{//}}{q_{//}^2 + (K_{i_\perp} + K_{f_\perp})^2} \Big| \; e^{-q_{//} Z_o} + 2 \cos(K_{i_\perp} + K_{f_\perp}) Z_o \Big| \qquad (23)$$

A secção eficaz diferencial

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega \, dE_f} = \left(\frac{E_f}{E_i}\right)^{1/2} \frac{m}{M} \frac{1}{E \hbar \omega_o} e^2 \left(\frac{d\mu}{ds}\right)^2 f^2 \qquad (24)$$

é proporcional a f^2, que por sua vez é dado por

$$f^2 = |f_\perp|^2 \cos^2 \Theta_o + |f_{//}|^2 \operatorname{sen}^2 \Theta_o \cos^2 \beta \qquad (25)$$

em que β é o ângulo entre as componentes paralelas do momento dipolar, $\mu_{o_{//}}$, e do vector de onda $q_{//}$ definido por

$$\cos \beta = \frac{1}{q_{//}} \Big| K_{i_{//}} \cos \varphi_o - K_{f_{//}} \cos (\varphi' - \varphi_o) \Big| \qquad (26)$$

No caso de uma molécula adsorvida na superfície metálica, os electrões de condução do metal tendem a blindar o campo eléctrico do dipolo oscilante. Trata-se de um efeito quase instantâneo quando a frequência dos osciladores moleculares for muito inferior à frequência do plasmão dos electrões metálicos [36]. Este efeito de blindagem é usualmente descrito, num modelo clássico, com a introdução do conceito de dipolo imagem fictício, situado a uma distância, $-Z_o$, abaixo da superfície [36, 37], cujas componentes, em conformidade com a fig. 7, são:

$$\mu^{im} = - \mu_{//}$$

$$\mu^{im}_\perp = \mu^{im}_\perp$$

Em termos deste sistema dipolo-dipolo imagem, as amplitudes de difusão totais serão:

$$f^{tot.}_\perp = f_\perp (Z_o) + f_\perp (-Z_o)$$

$$f^{tot.}_{//} = f_{//} (Z_o) + f_{//} (-Z_o)$$

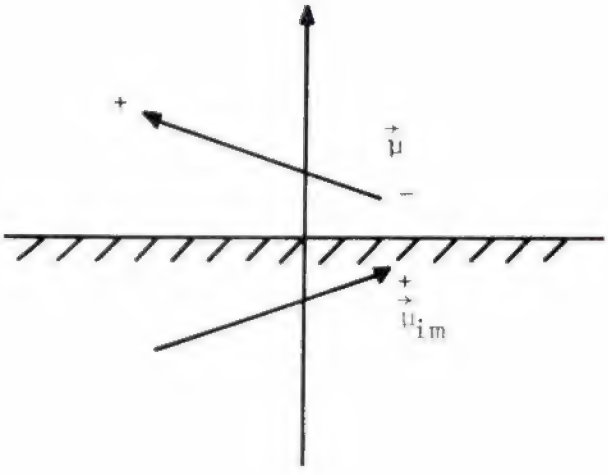


Fig. 8: Representação esquemática do dipolo μ_o e seu dipolo imagem μ_o^{im}

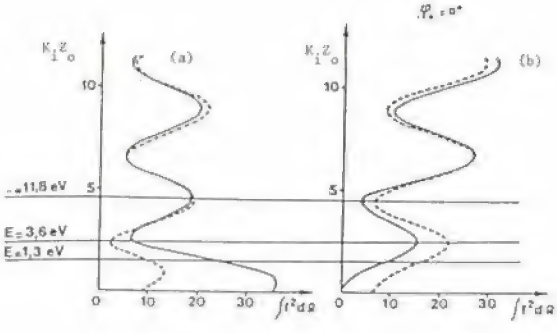


Fig. 9: Variação da secção eficaz total em função do produto $K_\perp Z_o$ para um electrão incidindo segundo $\Theta = 45°$ e com uma energia $E_i = 5{,}26$ $\hbar\omega$ (a) Dipolo normal à superfície (b) Dipolo paralelo à superfície. Valores de E correspondem a osciladores de energia $\hbar\omega = 0{,}25$ eV situado a $Z_o = 2{,}5$ Å. Reprodução de [33 e 36].

A fig. 9 permite verificar o efeito da contribuição do dipolo imagem em termos do produto K Zo. Assim, quanto mais pequeno for este, maior será essa contribuição. No caso limite de Zo = 0 a componente normal de $f^{tot.}$ é

$$f_\perp^{tot.} = 2\ f_\perp(Zo)$$

enquanto que a componente paralela é nula. O dipolo imagem gera, nestas circunstâncias, a eliminação da interacção com os modos que oscilam paralelamente à superfície e aumenta de quatro vezes a secção eficaz de interacção com os modos perpendiculares. Isto significa que só estes devem ser observáveis, o que corresponde à regra de selecção dipolar conhecida da espectroscopia do infravermelho.

Para o Zo não nulo, mas muito inferior ao comprimento de onda associado ao electrão, a contribuição das vibrações normais à superfície mantém-se preponderante. Pelo contrário, quando λ for da ordem de grandeza de Zo, a influência do dipolo imagem é fortemente atenuada e a interacção com os modos paralelos devém importante (fig. 9). Isto constitui uma diferença considerável entre a espectroscopia vibracional de perda de energia de elctrões e a espectroscopia do infravermelho.

A modulação de $f_\perp$ e $f_{//}$ explicitada nas equações 22 e 23, permite prever que, modificando a energia incidente, é possível variar a contribuição relativa dos modos perpendiculares e paralelos. Na fig. 9 é visível que uma energia $E_i = 11{,}8$ eV privilegia $f_\perp$ enquanto que $f_{//}$ é preponderante para $E_i = 3{,}65$ eV. Nestas circunstâncias, o estudo da evolução dos espectros em função da energia primária deve fornecer informações estruturais sobre a configuração das espécies adsorvidas [33].

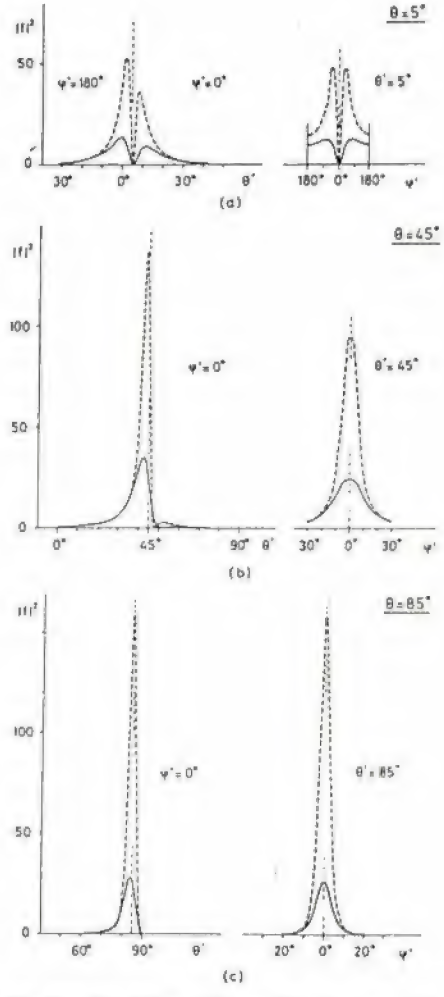


Fig. 10: Secção eficaz diferencial no caso de um dipolo na superfície (Zo = 0) para diferentes ângulos de incidência. Os resultados estão indicados para $\phi = 0$ e $\Theta' = 0$. Traço contínuo $E_i = 1{,}32$ eV, tracejado $E_i = 2{,}5$ eV (Reprodução de [36]).

A fig. 10 mostra a influência dos ângulos de incidência, de análise e de orientação do dipolo no caso particular de Zo nulo. Nela são considerados três ângulos de incidência, próximo da normal (5°), quase rasante (85°) e intermédio (45°) para os casos de electrões primários de energia iguais a 2,5 e 1,32 eV. Exceptuando a incidência quase normal, em que a probabilidade de transmissão do feixe é elevada, a secção eficaz apresenta um máximo na vizinhança da direcção especular. Isto significa que, pequenos desvios no alinhamento do analisador em relação à direcção especular, podem provocar erros de medida, sobretudo se os resultados forem referenciados ao pico elástico. No entanto, tais desvios podem ser interessantes por atenuarem o fundo contínuo elástico e isso permitir uma melhor separação das perdas devidas às vibrações.

Para Zo diferente de zero, a contribuição dos dipolos é modulada pelo ângulo β. Se a adsorção das moléculas for aleatória, o termo $\cos^2\beta$ tem um valor médio 1/2. Acontece, porém, ser frequente as moléculas adsorvidas tomarem orientações bem definidas em relação aos eixos privilegiados das superfícies. Nestas circunstâncias haverá valores particulares do ângulo β, o que abre perspectivas quanto à possibilidade de se obterem, a partir destes espectros vibracionais, informações sobre a orientação das moléculas adsorvidas em relação a uma superfície e mais concretamente em relação a eixos privilegiados desta última.

2..2.2 — *Interacção ressonante*

No estudo da interacção dipolar despreza-se o termo do potencial de curto alcance, admitindo que o tempo de permannêcia dos electrões na zona de influência deste potencial é suficientemente pequeno para poder provocar uma excitação. Esta hipótese deixa de ser válida sempre que se observar um mecanismo que obrigue o electrão a estar um tempo prolongado junto da molécula. Um desses processos consiste na captação do electrão num nível antiligante da espécie adsorvida, originando-se deste modo um ião negativo temporário. Na verdade, este mecanismo domina as secções eficazes diferenciais vibracionais das moléculas em fase gasosa [11] e a sua secção eficaz aumenta significativamente quando a energia corresponder à energia de ressonância [38].

Um mecanismo de difusão por ressonância foi considerado por Ho [39] e uma primeira abordagem foi realizada por Davenport [40]. Segundo o tratamento deste autor, as propriedades da interacção ressonante têm que ver com as características do estado ligado no qual o electrão fica temporariamente retido.

Em fase adsorvida, em que a posição da molécula está fixa, a probabilidade de formar temporariamente um ião negativo não depende só da energia do electrão incidente, mas também da sua direcção, que deve ser adaptada à simetria do ião formado. A distribuição angular dos electrões reemitidos reflecte, por outro lado, a simetria do estado ressonante. Estas duas propriedades podem pois ser utilizadas para determinar a geometria das ligações da molécula com o subtsracto.

O tratamento de Davenport mostra que a difusão ressonante não implica nenhuma regra de selecção (permitindo observar vibrações paralelas à superfície) e não produz unicamente nas direcções vizinhas da especular. Do ponto de vista experimental, isto deveria permitir distinguir a difusão ressonante da interacção. Acontece, porém, que o tempo de vida dos iões negativos é muito pequeno em fase adsorvida, o que dificulta a observação da difusão ressonante.

3 — DISPOSITIVOS EXPERIMENTAIS

Os aspectos teóricos relacionados com a espectrometria de perda de energia de electrões que referimos, definem, como grandezas físicas importantes nesta técnica, a energia E_i, dos electrões incidentes, a energia, ΔE, cedida por estes às moléculas do meio difusor e os ângulos de incidência, Θ, e de difusão Θ'. Agindo nestas grandezas é possível programar três formas de actuar experimentalmente.

- — a energia e a direcção do feixe incidente, bem como a direcção de difusão são mantidas constantes e analisa-se em energia o feixe difundido, pondo-se em evidência as diferentes perdas de energia,
- — as direcções dos feixes e um valor de perda de energia são fixos variando-se a energia incidente (recolhem-se assim, informações sobre o mecanismo de excitaçção da perda ΔE escolhida).
- — Mantém-se constante a energia, o ângulo de incidência e a perda ΔE e faz-se uma análise da distribuição angular dos electrões difundidos.

Para permitir realizar estes tipos de experiências, um espectrómetro terá que contar as seguintes três unidades, mais ou menos sofisticadas:

- — Um monocromador englobando uma fonte de electrões (cátodo mais canhão a electrões), um selector de velocidades e uma óptica de saída.
- — Uma câmara de difusão onde se coloca a amostra ou se injecta um gás.
- — Um analisador de electrões compreendendo uma óptica de entrada, um selector de velocidade e um detector de electrões.

Num dos primeiros espectrómetros, montado por Ramsauer [41] o conjunto destas unidades era colocado num campo magnético uniforme. Tratava-se de um aparelho simples, cujo funcionamento se baseava na não detecção, por uma gaiola de Faraday,
de todos os electrões que sofriam uma colisão com

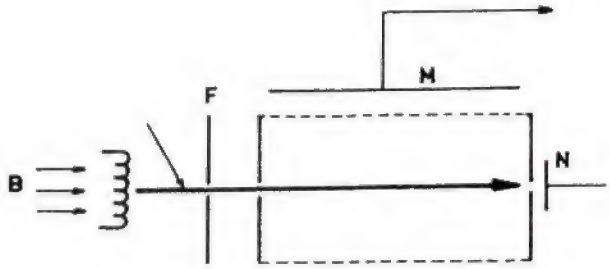


Fig. 11: Esqema simplificado do dispositivo de Schulz (Reprodução de [43]).

transferência de momento não nula. Permitia estudar a variação da intensidade de corrente eléctrica na gaiola de Faraday, em função da intensidade do campo magnético e por isso só fornecia dados sobre secções eficazes globais.

Shulz [42] desenvolveu um aparelho cujo princípio de funcionamento consistia em captar os electrões que, após uma colisão, ficavam com uma energia $E' < e V_p$, sendo V_p a profundidade de um fosso de potencial criado na câmara de colisão. Um esquema sucinto deste espectrómetro está representado na fig. 11 [43].

O feixe de partículas, emitido por um canhão de electrões, é focalizado por um campo magnéstico coaxial, de fraca intensidade (100 a 500 Gauss) e acelerado por uma diferença de potencial, V_A, aplicada entre F e a câmara de colisão. Esta, é um cilindro, centrado no eixo do feixe e constituída por uma grelha G, limitada, nas suas extremidades, por duas placas paralelas dotadas de um diafragma circular. Uma diferença de potencial aplicada entre M e G, cria um fosso de potencial V_p ($\approx$ 1% da tensão entre M e G) ao longo do eixo do cilindro. Todos os electrões de energia residual $E' < e V_p$ ficam retidos no eixo e difundem posteriormente até ao colector M. As restantes partículas são recolhidas em N.

Medindo a variação de intensidade de corrente no circuito do eléctrodo M, em função da energia dos electrões incidentes, observam-se máximos da curva sempre que a energia E' estiver compreendida entre E_n e $E_n + eV_p$, sendo E_n a energia de um nível excitado.

O espectrómetro de Shulz adapta-se bem ao estudo de transições com grande transferência de momento não descritos pela aproximação de Born, pois o seu funcionamento parte da detecção de electrões que cederam ao alvo praticamente toda a sua energia cinética. É, por outro lado, dotado de uma grande sensibilidade pois, a coleta de electrões pelo eléctrodo M, tem um rendimento muito perto dos 100 %. Um inconveniente deste aparelho é o de não fornecer dados sobre a difusão angular, uma vez que a detecção de electrões é feita segundo uma geometria 4π.

Este tipo de dispositivo foi retomado por outros autores [11, 44, 45], mas mais recentemente Sanche [46, 47] adaptou-o de forma a permitir a análise, em transmissão, de substâncias sólidas. Os electrões orientados por um campo magnético são seleccionados por um monocromador trocoídeo e incidem na amostra. Esta é depositada, sobre uma fita de tungsténio arrefecida à temperatura do azoto líquido, por condensação de um vapor. A intensidade de corrente devida aos electrões que atravessam o alvo é então medida em função da energia incidente.

A selecção dos electrões difundidos pode ser feita com o auxílio de um potencial retardador. É o que se passa no espectrómetro sugerido por Kupperman [48, 49]. Uma representação esquemática permitindo compreender o princípio do seu funcionamento está indicada na fig. 12.

O canhão de electrões compreende um cátodo e um diagrama F levado a uma tensão ligeiramente negativa em relação ao cátodo.

A câmara de colisão é limitada por um eléctrodo plano com um diafragma circular e por uma grelha G_1, cilíndrica. O conjunto é polarizado positivamente em relação a F, de forma a acelerar os electrões incidentes.

O analisador de electrões difundidos é constituído por um conjunto de grelhas, G_2 e G_3, e por um eléctrodo colector, M. Os electrões não difundidos são detectados por uma gaiola de Faraday, diante da qual uma grelha, G', se destina a repelir os electrões secundários arrancados às paredes da gaiola.

Para uma dada energia dos electrões incidentes, polariza-se a grelha G_3, de forma a que nenhum electrão difundido possa atingir o eléctrodo M. Diminuindo progressivamente o campo retardador existente entre G_3 e G_2, vamos detectando os electrões difundidos começando portanto, pelos mais energéticos. Recolhem-se, deste modo, curvas integrais de intensidade de corrente em função do potencial retardador. As curvas terão então que ser diferenciadas para se obterem os espectros.

Este tipo de dispositivo não fornece também informações angulares e a existência de uma corrente resi-

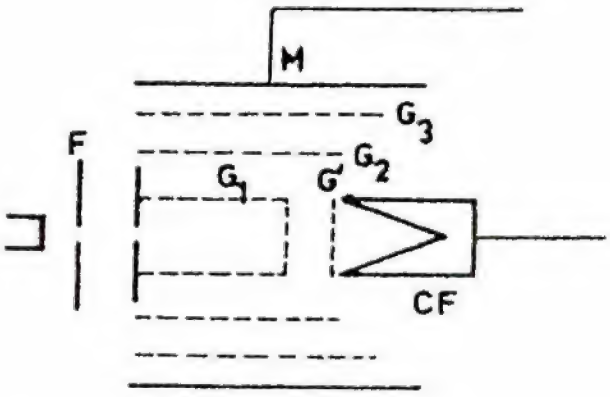


Fig. 12: Esquema simplificado do espectrómetro de Kuppermann (Reprodução de [43]).

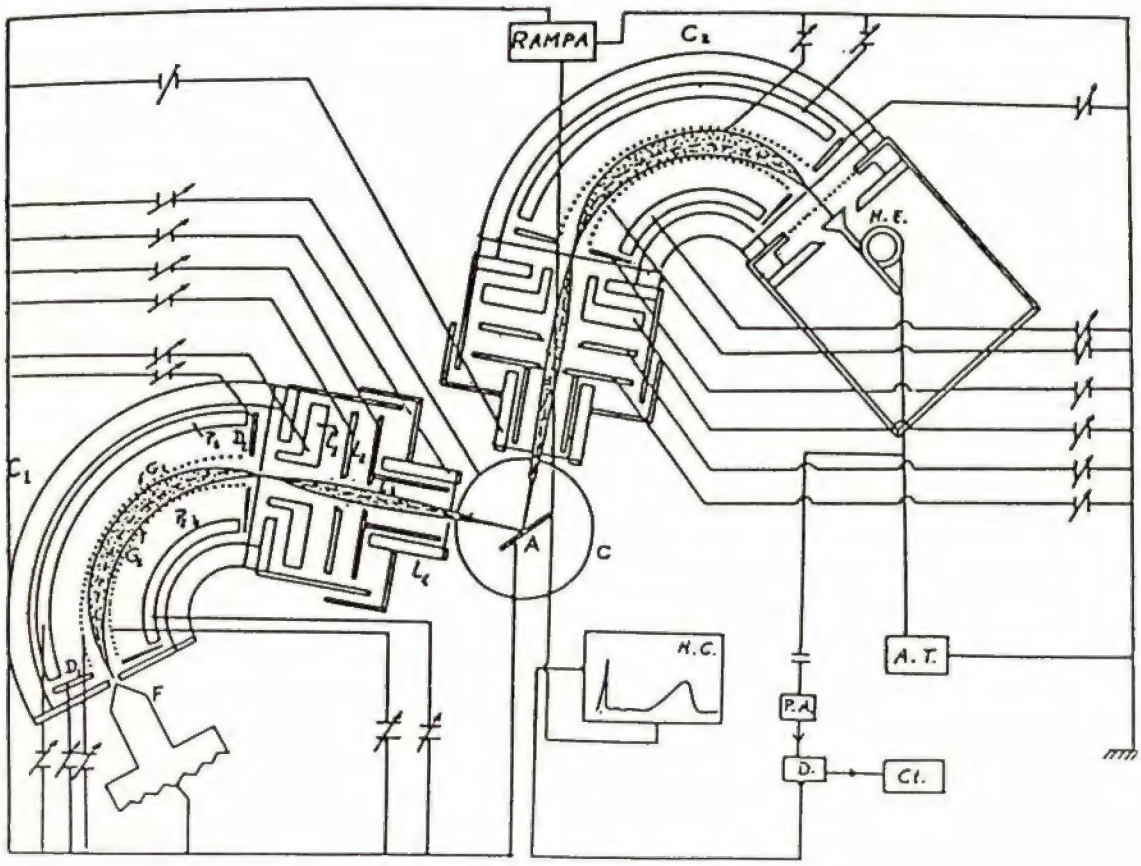
dual limita o valor mínimo de energia com que se podem efectuar medidas.

O esquema da fig. 12 refere-se a experiências com alvos gasosos, mas por uma mudança de geometria é possível trabalhar com amostras condensadas [50].

O estudo experimental da influência dos ângulos de incidência e de difusão nas secções eficazes de excitação, só é possível se o monocromador e o analisador de electrões puderem rodar um em relação ao outro. O primeiro dispositivo com esta característica foi apresentado no início dos anos 30 por Bullard [51]. Posteriormente, assistiu-se a um desenvolvimento enorme deste tipo de espectrómetros de electrões. Klein [43] historia essa evolução até 1968 e dos trabalhos por ele referidos citamos, pela sua importância, os de Hugher [52] e Ehrhardt [53, 54]. Depois de 1968, são de referir as contribuições de Ballu [55, 56], Read [56, 58], Preston [59], Roy [60], Froitzheim [61], e Ergenton [62, 63.] Os artigos de revisão de Celotta [15] e de Raether [64] contêm citações com interesse.

Neste artigo desenvolvemos, com algum detalhe, um dispositivo, semelhante ao de Roy, montado por Rei Vilar [7, 65], e especialmente destinado à obtenção de espectros de perda de energia de electrões lentos rectrodifundidos por alvos condensados. A representação esquemática deste espectrómetro está indicada na fig. 13.

Os electrões emitidos por um filamento de tungs-



C_1 - MONOCROMADOR

C_2 - ANALISADOR

F - FILAMENTO

P_1 e P_2 - PLACAS DEFLECTORAS

G_1 e G_2 - GRELHAS

D_1 e D_2 - DIEDROS

L_1, L_2, L_3 e L_4 - ELÉCTRODOS DA LENTE

C - CILINDRO

A - PORTA - AMOSTRAS

M.E - MULTIPLICADOR DE ELECTRÕES

P.A. - PRÉ - AMPLIFICADOR

D - DISCRIMINADOR

CT - CONTADOR

M.C - MULTICANAL

Fig. 13: Esquema de um espectrómetro de electrões lentos com possibilidade de análise angular [7, 60].

ténio revestido a tório, são acelerados a cerca de 6 eV e entram através de um diafragma num monocromador electrostático, C_1, de forma cilíndrica (27°). O campo eléctrico é mantido entre duas grelhas, G_1 e G_2, e os electrões não seleccionados são capturados pelas placas de cobre P_1 e P_2. A energia dos electrões incidentes pode variar entre o e algumas centenas de eV e é definida pelo potencial aplicado à amostra. Esta é colocada na câmara de ionização mantida equipotencial. Os electrões difundidos são seleccionados no analisador, G_2, idêntico ao monocromador e detectados por um multiplicador de electrões (Chaneltron). Os impulsos são amplificados, discriminados, contados e recebidos num sistema de análise de sinais (analisador multinacional e/ou microcomputador). Um sistema de variação contínua de tensões (rampa) aplicado, por exemplo, ao analisador, varre a gama de perda de energia dos electrões, desde zero (pico elástico) até à energia incidente (secundários verdadeiros) o número do canal do analisador multicanal. Todo o sistema é blindado electrostáctica e magneticamente e fica sob um vácuo de $\approx 10^{-8}$ Torr.

Terminamos este resumo sobre dispositivos experimentais, assinalando a associação que muitos autores têm feito de um espectrómetro de electrões a um microscópico electrónico. Um trabalho de revisão de progressos obtidos neste campo foi publicado por Colliex [66]. No entanto para uma visão do muito que se tem publicado sobre este assunto, convidamos o leitor interessado a consultar um artigo recente de Egerton [67], onde este autor compilou cerca de 700 referências.

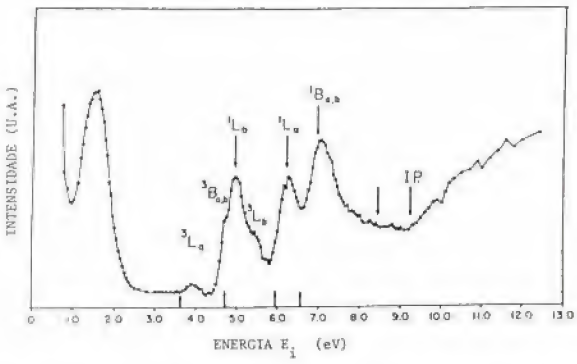


Fig. 14: Espectro de excitação do benzeno (Reprodução de [68]).

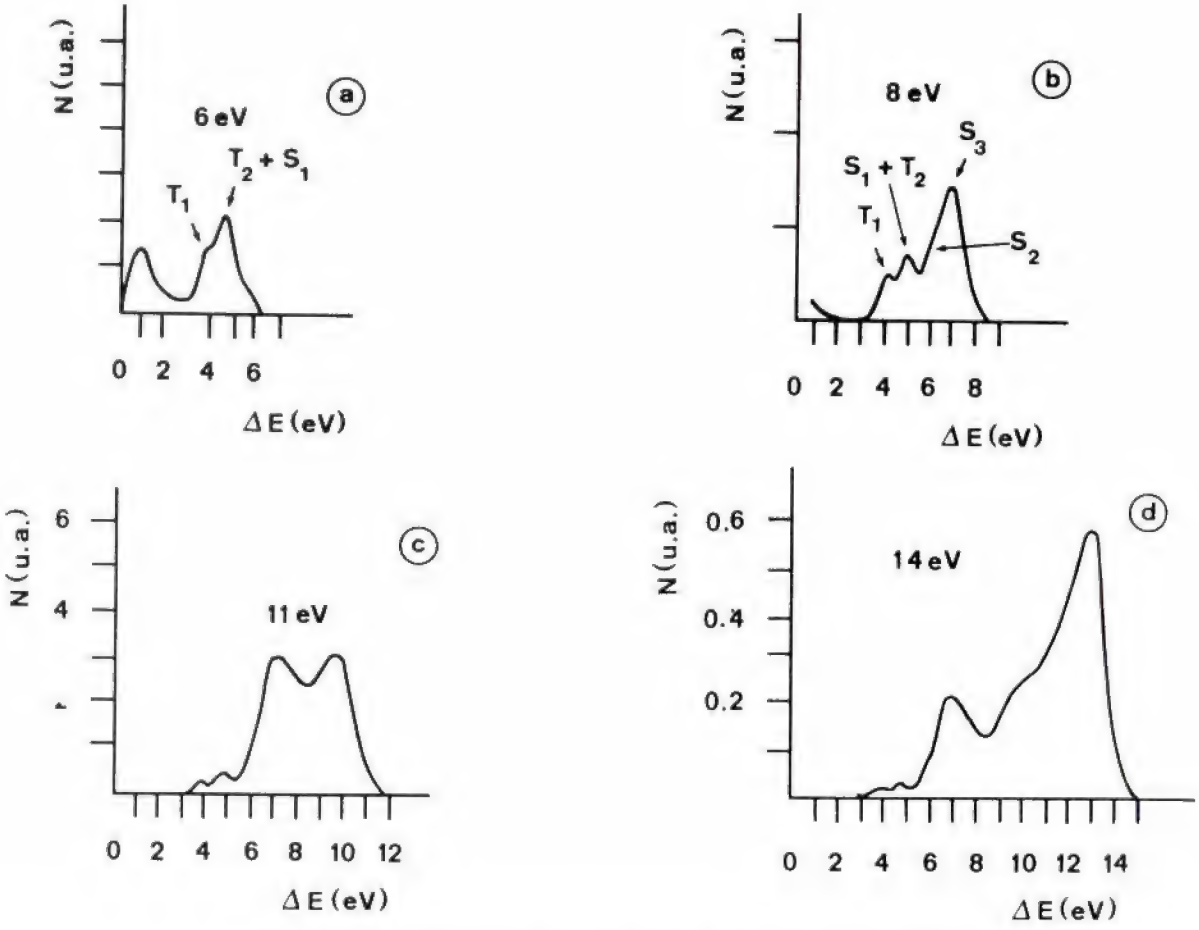


Fig. 15: Espectro de perda de energia de electrões em benzeno obtido para várias energias incidentes (a) 6 eV (b) 8 eV (c) 11 eV e (d) 14 eV (Reprodução [69]).

4 — EXEMPLOS DE ESPECTROS DE PERDA DE ENERGIA DE ELECTRÕES

Reproduzimos neste parágrafo alguns espectros de electrões difundidos, procurando dar uma ideia das potencialidades da técnica que temos vindo a analisar. A selecção que fizemos é necessariamente limitada pois, são muitos os resultados experimentais até agora publicados. Assim, concentrámos a nossa atenção essencialmente sobre três questões: a excitação de níveis de energia dificilmente acessíveis por meios ópticos, a possibilidade de recolher certas características moleculares através de análise adequada dos espectros e o estudo de substância adsorvidas em superfícies metálicas. No final do parágrafo indicaremos algumas referências sobre outros tipos de aplicações eventuais desta espectroscopia.

4.1 — Estudo das excitações moleculares do benzeno

Para mostrar o interesse da espectroscopia de perda de energia de electrões na identificação de estados de energia, não observáveis facilment por espectroscopia óptica, optámos por seleccionar trabalhos publicados sobre uma substância: benzeno.

O espectro da fig. 14, publicado por Compton [68] e obtido por transmissão através de filmes finos de benzeno, dá uma ideia do tipo de informação recolhida. Os picos obtidos identificam-se bem com os níveis energéticos tripleto e singuleto do benzeno, o que mostra a possibilidade da técnica no estudo das transições opticamente proibidas. O pico intenso de perda de energia, observado a 1,55 eV, está abaixo do estado electrónico e foi interpretado como correspondendo a um ião negativo de ressonância.

Utilizando um espectrómetro do tipo Kuppermam, Merkel [69], estudou a evolução dos espectros em função da energia dos electrões incidentes (6, 8, 11 e 14 eV) fig 15. É possível verificar que a excitação dos

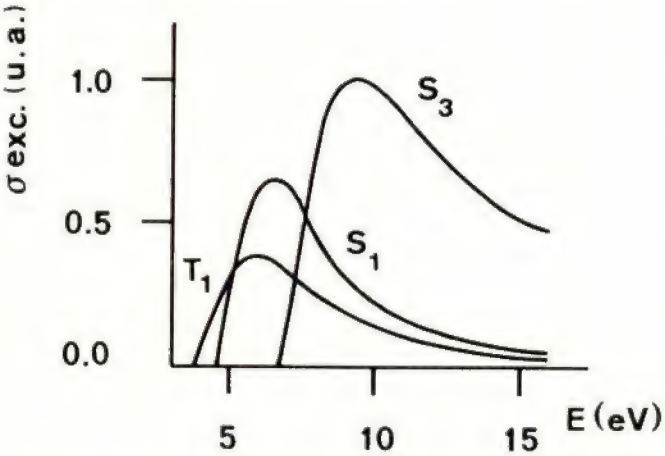


Fig 16: Secção eficaz de excitação dos níveis T_1, S_1 e S_3 do benzeno, em função da energia incidentes (Reprodução de [69]).

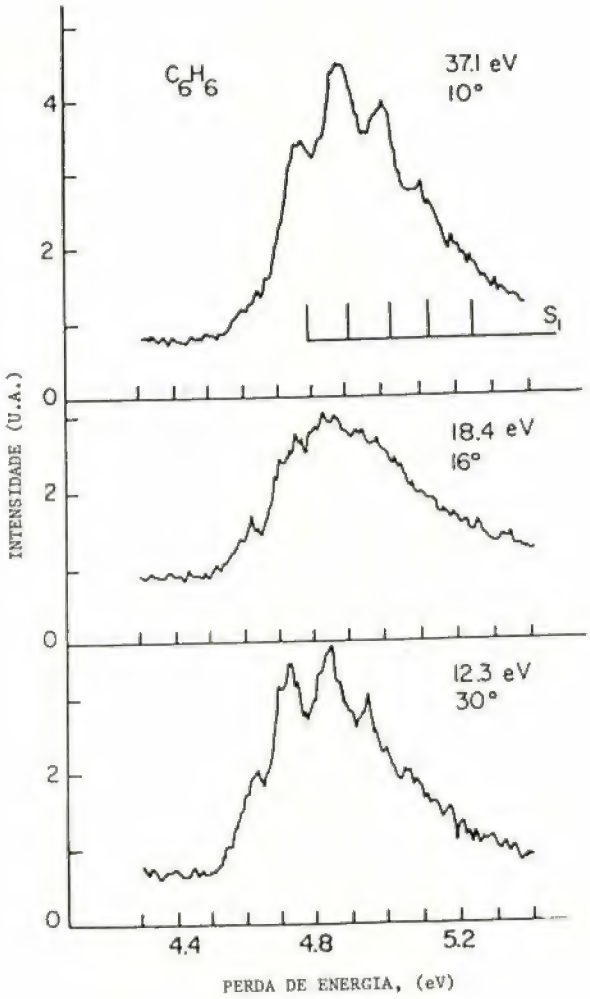


Fig. 17: Espectro de perda de energia de electrões de 13,6 eV em benzeno, para valores de $\Theta' = 9°$, 23° e 54° (Reprodução de [70]).

níveis tripletos é mais importante para energias primárias mais baixas ($\approx$ 10 eV). A fig. 16 mostra valores relativos das secções eficazes de excitação para os estados T_1 (interdita por spin), S_1 (interdita por razões de simetria) e S_3 (opticamente permitida).

A influência da direcção de difusão sobre os espectros foi estudada por Doering a partir de espectros obtidos com uma energia incidente fixa (13,6 eV) mas detectando os electrões difundidos, segundo três ângulos diferentes ($\Theta' = 9°$, 22° e 54°). Os resultados deste autor (fig. 17) confirmam a importância do ângulo Θ' na observação das excitações tripletos. Na verdade, a probabilidade de registo de uma transição singuleto-tripleto aumenta para valores crescentes do ângulo de difusão, como aliás, se depreende melhor da fig. 18.

Jogando simultaneamente com a energia incidente e o ângulo Θ', podemos portanto encontrar as melhores condições experimentais de análise de uma dada excitação. A fig. 19 representa a zona do espectro do benzeno correspondente ao intervalo de perdas compreendido entre 4,3 e 5,5 eV (inclui excitações T_2 e S_1), obtida em três condições experimentais diferentes (três pares de valores $E_i(\Theta')$, [71]. Observa-se deste

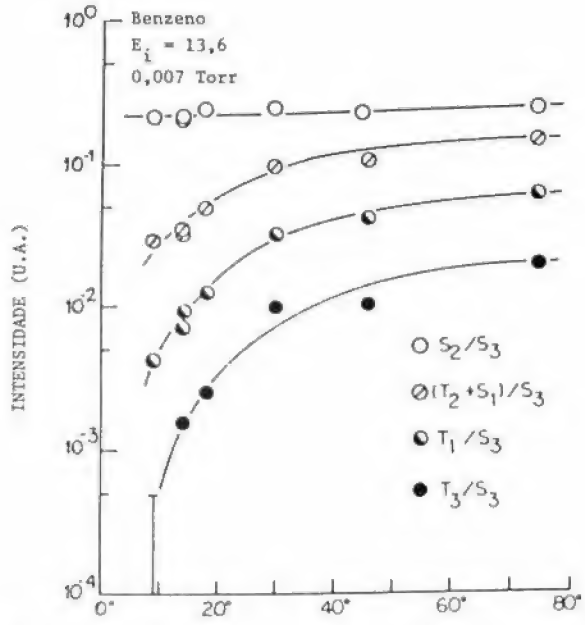


Fig. 18: Razões de intensidades de várias transições observadas no espectro do benzeno em função do ângulo de difusão Θ'. Energia incidente 13,6 eV (Reprodução de [70]).

modo que E_i elevados e Θ' pequenos (parte a da fig.), permitem individualizar a transição $S_0 \rightarrow S_1$, incluindo excitações vibracionais do estado S_1 do benzeno. Pelo contrário, valores baixos de E_i e elevados de Θ', favorecem a observação da transição interdita $S_0 \rightarrow T_2$ (parte c da figura). Nas condições intermédias da fig 19b, o espectro é menos explícito devido à mistura das duas excitações.

Christophorou, no seu artigo de revisão [27], ocupou-se do pico que aparece a 1,55 eV na fig. 14, relacionando-o com a formação de um ião negativo temporário. São assim, referidos trabalhos de Boness [72] e de Sanche [73] mostrando a estrutura vibracional do pico correspondente ao ião de ressonância (ver fig. 20) e de Larkin [74], que interpretou a natureza do processo envolvido.

Outros resultados experimentais sobre o benzeno poderiam ainda ser citados. Pensamos porém, que os indicados são susceptíveis de mostrar a importância da espectroscopia de perda de energia de electrões na observação e identificação da natureza de excitações moleculares.

4.2 — Espectros de perda de energia e teoria dieléctrica

Fazemos agora uma breve referência à interligação entre os espectros de perda de energia e a teoria dieléctrica. Conforme referimos no ponto 2, é possível reproduzir um espectro a partir do conhecimento da função de perda $I(-1/\varepsilon)$ calculada a partir do conhecimento da constante dieléctrica do meio (ver fig. 4). Assinalámos igualmente ser possível o caminho inverso: a partir do espectro determinar $I(-1/\varepsilon)$, a constante dieléctrica e finalmente certas características moleculares. Daniels [22] e Raether [64] dão vários exemplos de trabalhos deste tipo. Neste trabalho, fazemos referência a contribuições de Ritsko para o estudo do poliestireno e do poliacetileno.

No caso do poliestireno [25], a função de perda foi calculada a partir de um espectro de excitação de valência e do cor de electrões, estendendo-se num intervalo de perda de energia de 1 a 400 eV e irradiando com electrões de 80 KeV. A partir da função de resposta foi caclculada a reflectividade e o índice de refracção, tendo-se verificado um acordo excelente com resultados experimentais obtidos por via óptica. É o que se pode observar na fig. 21 no que respeita à reflectividade. Nesta figura indicam-se ainda coeficientes de absorção óptica calculados a partir da função de perda.

Para estudar a estrutura electrónica do poliacetileno Ritsko [75, 76] analisou os espectros de filmes finos desta substância, pura e contendo AsF_5 ou I_2 como impurezas.

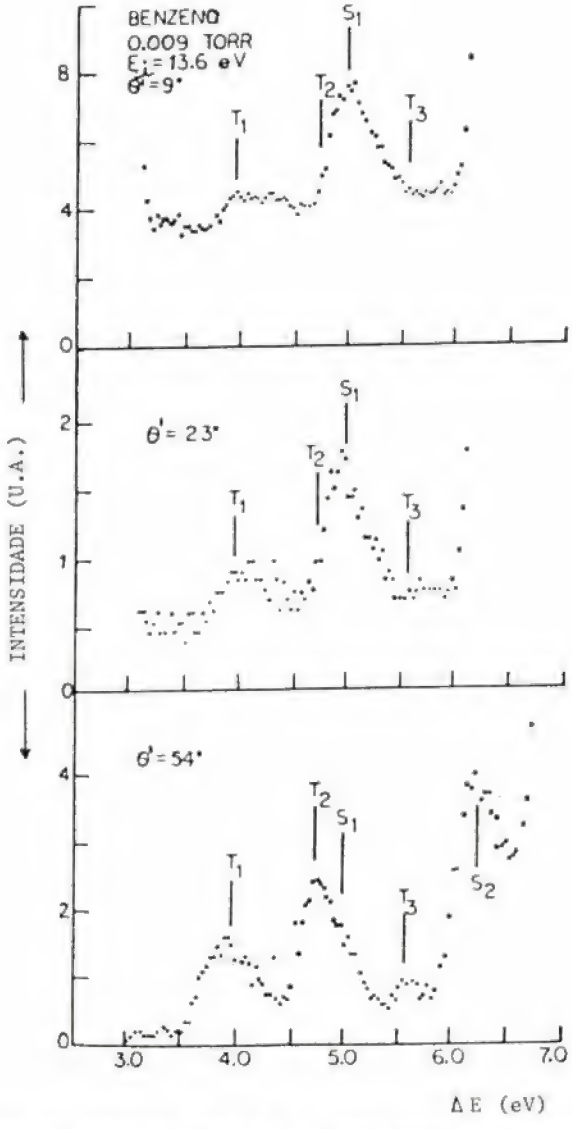


Fig. 19: Região de perdas ΔE situada entre 4,3 e 5,5 eV de espectros de perda de energia de electrões em benzeno, obtidos para três pares de valores $E_i\Theta'$: (37,1 eV — 10°), (18,4 eV — 16°) e (12,3 eV — 30°). (Reprodução de [27]).

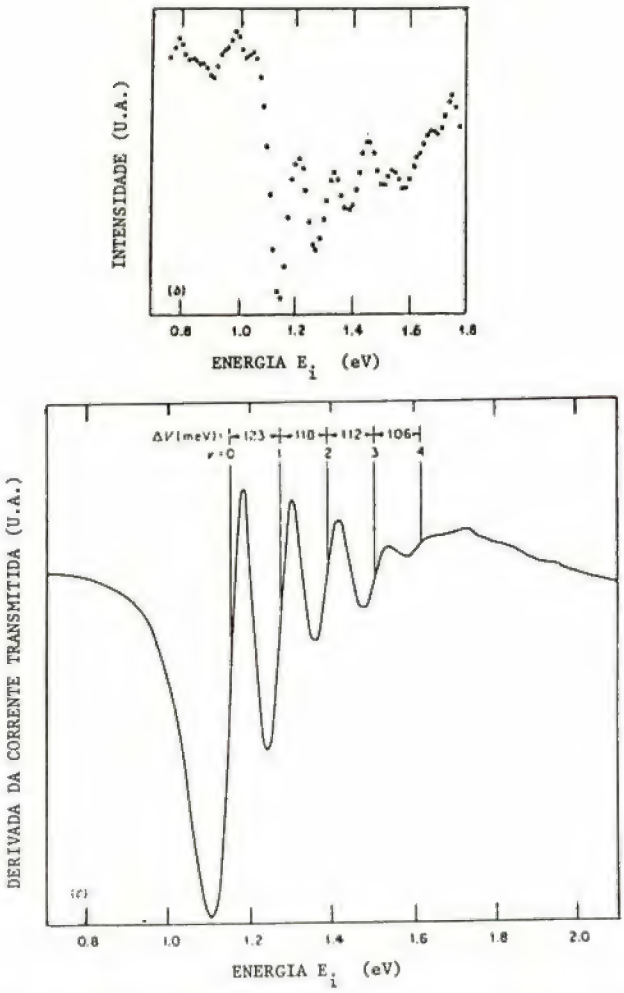


Fig 20: Espectro de perdas de energia de electrões lentos (< 5 eV) pondo em evidência excitações vibracionais. (Reprodução de [27]).

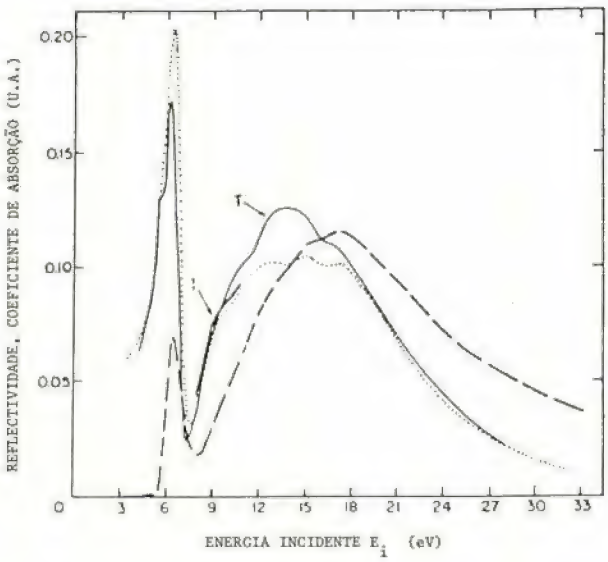


Fig. 21: Coeficientes de absorção e reflectividade do poliestireno; T: reflectividade medida com radiação sinclotrão; I: reflectividade medida por absorção óptica; curva a ponteado: reflectividade calculada a partir da função de perda; curva a tracejado: coeficientes de absorção óptica calculados. (Reprodução de [25]).

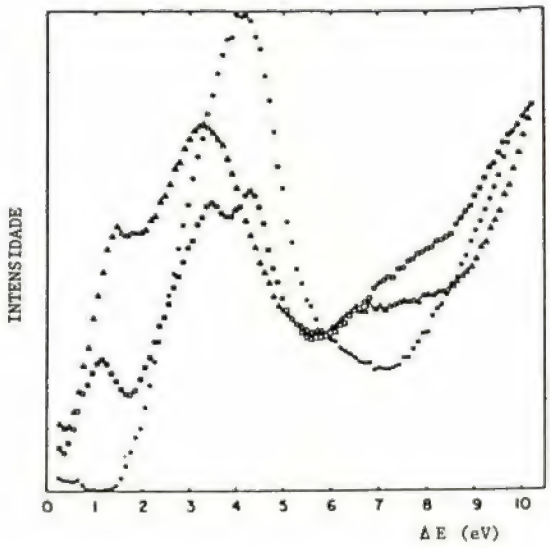


Fig. 22: Espectros de perda de energia de electrões de 80 KeV em poliacetileno puro (.), dopado com I_2 (□) e com AsF_5 (△). Reprodução de [76]).

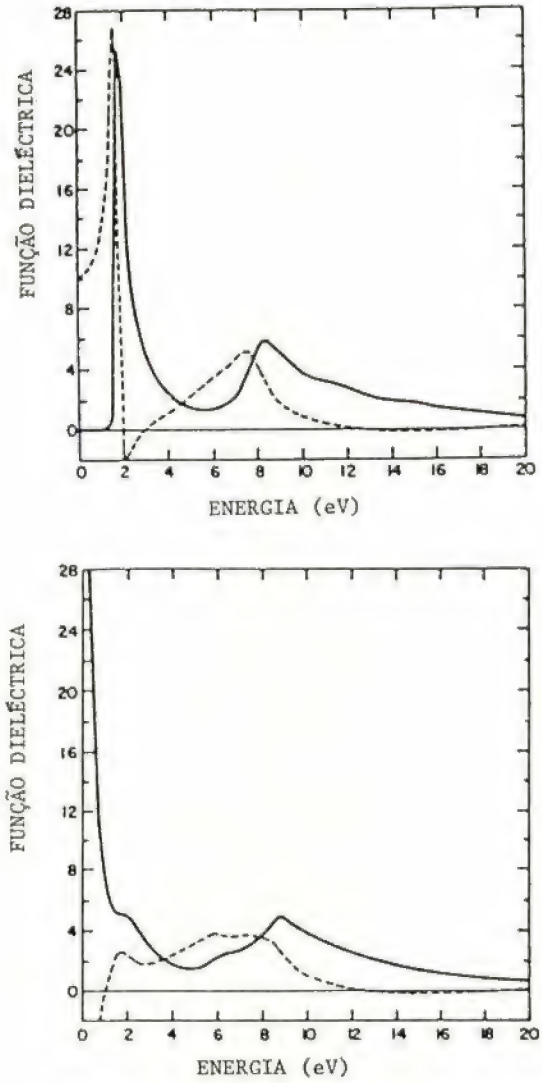


Fig. 23: Constantes dieléctricas ε_1 (——) e ε_2 (——) calculadas a partir dos espectros da fig. 22 (a) poliacetileno puro (b) poliacetileno dopado com AsF_5. (Reprodução de [76]).

Como se verifica na fig. 22, o espectro do poliacetileno puro é caracterizado por um limiar de absorção de 1,4 eV e um pico alargado centrado em 4,5 eV. As curvas referentes ao polímero dopado evidenciam um aumento de absorção na zona do «gap», assim como um novo pico à volta de 1 eV, de fraca resolução, mas mais pronuciado no caso do iodo. A figura mostra ainda, que a introdução deste último elemento provocou uma mistura mais heterogénea de regiões dopadas e não dopadas do que a do AsF_5 (o pico a 4,5 eV persiste ainda).

Aplicando a análise de Kramers-Kronig [22], Ritsko calculou as curvas referente às partes real e imaginária da constante dieléctrica indicadas na fig. 23. Recolhendo os valores de ε_1, e de ε_2 da parte *a* da figura e calculando $\varepsilon_2/(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2)$, é possível observar um máximo a 1,8 eV na função de perda que foi interpretado como correspondendo a uma absorção interbanda. A parte *b* da figura evidencia que o pico intenso de ε_2 se deslocou, por efeito da dopagem, para as energias muito baixas, o que é consistente com o desaparecimento do gap característico de um comportamento semicondutor. As excitações dominantes passam a ser próprias de um metal. A análise de Kramers-Kronig mostra que o pico oservado a 4,1 eV ocorre depois de ε_1 passar por zero, numa região onde ε_2 é relativamente pequena e decresce rapidamente (fig. 23a). Este pico é então interpretado como um plasmão associado com excitações colectivas dos electrões π.

4.3 — Análise da emissão secundária

A análise da parte do espectro correspondente à emissão de electrões secundários, apresenta, para algumas substância, ligeiras estruturas, igualmente observadas em experiências de fotoelectrão [77-80]. Como se pode verificar pela figura 24, a posição em energia das estruturas é independente da energia da partícula incidente e da natureza da radiação (electrões ou fotões), o que parece indicar que a sua origem é independente destes factores. Mecanismos susceptíveis de contribuirem para o aparecimento destas estruturas podem em princípio ligar-se a:

— excitação de electrões para a banda de condução
— difusão inelástica de electrões incidentes
— electrões excitados por declínio Auger ou autoionização de excitões de energia elevada

A interpretação de Ueno dos resultados da fig. 24 [79] não contempla estes últimos mecanismos. O autor mostra como, para as substâncias consideradas, alcanos, a análise dos «acidentes» da emissão secundária permite tirar conclusões sobre a banda de condução, nomeadamente qua sua estrutura é quase independente do número de átomos de carbono.

A autoionização de excitações de energia elevada é

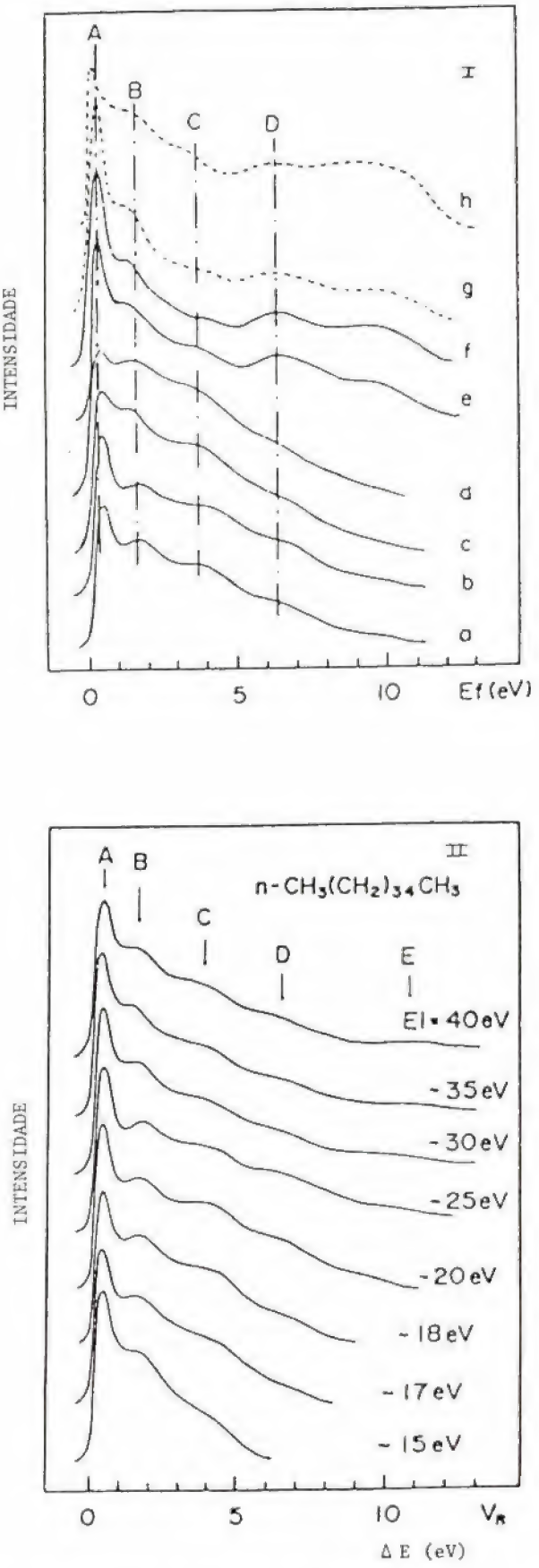


Fig. 24: Estruturas da emissão de electrões secundários: (I) Espectro de perda de energia de electrões de 20 eV em: (a) n-$C_{28}H_{58}$, (b) n-$C_{36}H_{74}$, (c) n-$C_{44}H_{90}$, (d) polietileno; Espectro de fotoelectrão U.V. (21,2 eV) em: (e) n-$C_{28}H_{58}$, (f) n-$C_{36}H_{74}$, (h) — polietileno: II Espectro de perda de energia de electrões em n-$C_{36}H_{74}$. (Reprodução de [79]).

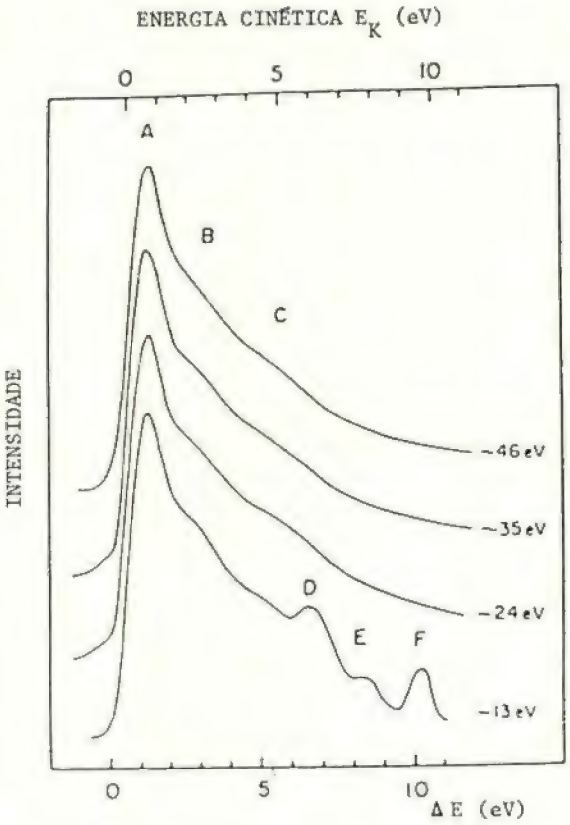


Fig. 25: Espectro de electrões secundários de perileno policristalino para várias energias incidentes. Abcissa inferior: perda de energia, Abcissa superior: energia cinética E_K dos electrões secundários. (Reprodução de [77]).

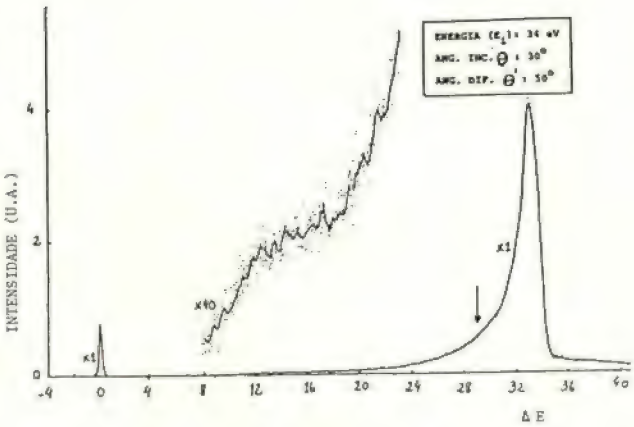


Fig. 26: Espectro de perda de energia de electrões de 34 eV em poliestireno.

observável noutros trabalhos de Ueno [77, 78] sobre cristais orgânicos. É o caso das estruturas A e B atribuídas aos electrões emitidos no declíneo das excitações correspondentes às perdas de energia D (6,42 eV) e E (8,3 eV). Tomando como energia de ionização do perileno o valor de 5,8 eV obter-se-ia, para a energia cinética dos electrões correspondentes às estruturas A e B, respectivamente 0,62 e 2,5 eV, valores não muito diferentes dos determinados por espectroscopia do fotoelectrão [81]. A natureza da bossa centrada à volta da perda de energia de $\approx$ 5 eV foi interpretada como consequência da estrutura da banda de condução [78].

Um resultado semelhante ao obtido por Ueno com cristais, foi observado na emissão secundária em filmes de poliestireno [7]. Com efeito, parece existir uma correlação entre a banda centrada a 13 eV e identificada como um plasmão característico do poliestireno [25], e o cotovelo que se apercebe à volta de 29 eV no pico dos secundários (fig. 26). Na verdade, admitindo que a energia de um estado superexcitado é igual à do plasmão que lhe deu origem, podemos calcular, a partir da figura, para a energia de ionização do poliestireno um valor $\approx$ 8 eV, que está de acordo com dados da literatura [82, 83].

4.4 — Espectros vibracionais de substâncias adsorvidas em superfícies metálicas

Os exemplos que vamos citar foram seleccionados dos vários apresentados por Bertolini [33] e Lopez [34]. A figura 27 refere-se aos espectros obtidos por Barnes [84] para estudar a adsorção de hidrogénio sobre a face (100) do tungsténio. Nas partes *a* e *c* da da figura, o feixe de electrões difundidos é observado segundo a direcção especular, $\Delta\Theta = 0$, enquanto que *b* e *d* foram medidas fora dessa direcção, $\Delta\Theta = 25°$. Para uma dada direcção de difusão os espectros diferem entre si, por um deles corresponder ao caso da superfície estar saturada com hidrogénio. Em todas as experiências a energia incidente foi de 5,5 eV e o ângulo de incidência 60°.

No caso da superfície saturada em hidrogénio ($\Theta_H = 2$) a análise dos electrões rectrodifundidos na fig. 27a revela um só pico a 130 mev, que deve ser associado a um modo de vibração, ν_1, perpendicular à superfície (recorde-se que os modos normais têm uma contribuição preponderante). Por outro lado, a existência de um só modo leva a supor que o hidrogénio adsorvido deve estar em posição linear (átomos de H por cima de átomos de W) segundo uma simetria $C_{\infty V}$) de ligação ao substrato.

A recolha do espectro fora da direcção especular faz aparecer duas novas vibrações (ν_2 a 80 meV e ν_3 a 160 meV), que são identificadas com vibrações de um hidrogénio posicionado como se indica na fig. 27b. A geometria das ligações do átomo de hidrogénio é então em ponte, com simetria C_{2V}.

Comparando os espectros *a* e *b* com os indicados em *c* e *d*, observa-se que as energias de vibração variam em função do teor de recobrimento em hidrogénio. Nota-se uma passagem de uma estrutura ordenada $C(2 \times 2)H$ se $\Theta_H < 0,5$, para a estrutura $p(1 \times 1)H$ se $\Theta_H = 2$ e que ela está ligada às variações de energia:

$C(2\times2)H$	$\nu_1 - 155$ meV	$\nu_2 - 60$ meV	$\nu_3 - 125$ meV
$p(1\times1)H$	$\nu_1 - 130$ meV	$\nu_2 - 80$ meV	$\nu_3 - 160$ meV

Continuando a observar 3 vibrações, isso significa que a ligação hidrogénio continua a ser em ponte.

A modificação do valor das energias de vibrações tem que ver com o valor do ângulo α definido por W-H-W que é inferior a $\pi/2$ no caso da estrutura C(2 × 2) e superior a este valor para a estrutura p(1 × 1).

Um outro exemplo com interesse, corresponde à adsorção do CO. A fig. 28 reproduz os picos característicos dos espectros vibracionais de CO adsorvido em Pt (1, 1, 1) [85] e Ni(1,1,1) [33]. Nas experiências sobre platina e com um recobrimento $\Theta < 0{,}33$ só se observa uma espécie de CO adsorvida, caracterizada pela vibração de valência C-0(ν_{CO} — 259 mev) e C-metal (ν_{CM} — 58 meV), fig. 28a. Para um recobrimento tal que $0{,}33 < \Theta_{CO} \leqslant 0{,}5$ (estrutura C(4 × 2)), nota-se a presença de duas espécies de CO adsorvidas, fig. 28b, caracterizadas por ν_{CO} — 126 meV e ν_{CM} — 58 meV (semelhante à anterior) e por ν_{CO} — 232 meV e ν_{CM} — — 45 meV. No caso de adsorção sobre Ni (111) a forma do espectro mantém-se quando variam as razões de recobrimento em CO, fig. 28c, e assemelha-se à estrutura que se obtém para $0{,}33 < \Theta_{CO} < 0{,}5$ no caso da P_T (111). Assinala-se a presença de um pico de fraca intensidade a 79 meV, associado a uma vibração ν_{CM} assimétrica (paralela à superfície).

A observação de um só modo vibracional C-metal (58 meV) na adsorção sobre P_T com baixo teor de recobrimento, sugere a existência de espécies lineares. Aumentando o recobrimento, é de esperar o aparecimento de ligações em ponte. No níquel só é de esperar uma ligação em ponte. A energia da vibração ν_{CO} é muito sensível ao local de adsorção. O valor 260 meV está associado ao CO linear enquanto que os 230 meV ao CO em ponte. O estudo da Quimisorção do CO pode deste modo fornecer dados sobre os locais de adsorção.

Como último exemplo, vamos referir a adsorção de hidrocarbonetos em C_2 sobre platina e níquel. A observação dos espectros de vibração de hidrocarbonetos em C_2, adsorvidos sobre platina, em diferentes condições experimentais, fig. 29, mostra a sensibilidade da técnica na observação da natureza dos grupos que aparecem à superfície.

A parte *a* da figura 29 refere-se a experiências a uma temperatura abaixo de 300 K, com C_2H_2 e C_2D_2 adsorvido. O pico a 162 meV, não é afectado pela deuteração, pelo que deve corresponder ao modo de elongação ν_{C^-C}. Os outros picos implicam movimentos de átomos de hidrogénio e foram atribuídos a vibrações de deformação (95 e 122 meV) e de elongação (373 meV) de C-H. A grande intensidade do pico a 95 meV leva a pensar que ele se refere a um modo normal à suprfície, estando os outros principalmente polarizados paralelamente à superfície.

A temperaturas inferiores a 260 K, a adsorção de etileno, com teor de recobrimento elevado, conduz ao espectro da fig. 29b. Os picos a 176, 123 e 98 meV identificam-se com grupos CH_2. A vibração a 364 meV revelaria uma hibridação do tipo sp^3 para os átomos de carbono. A perda a 152 meV corresponde a um

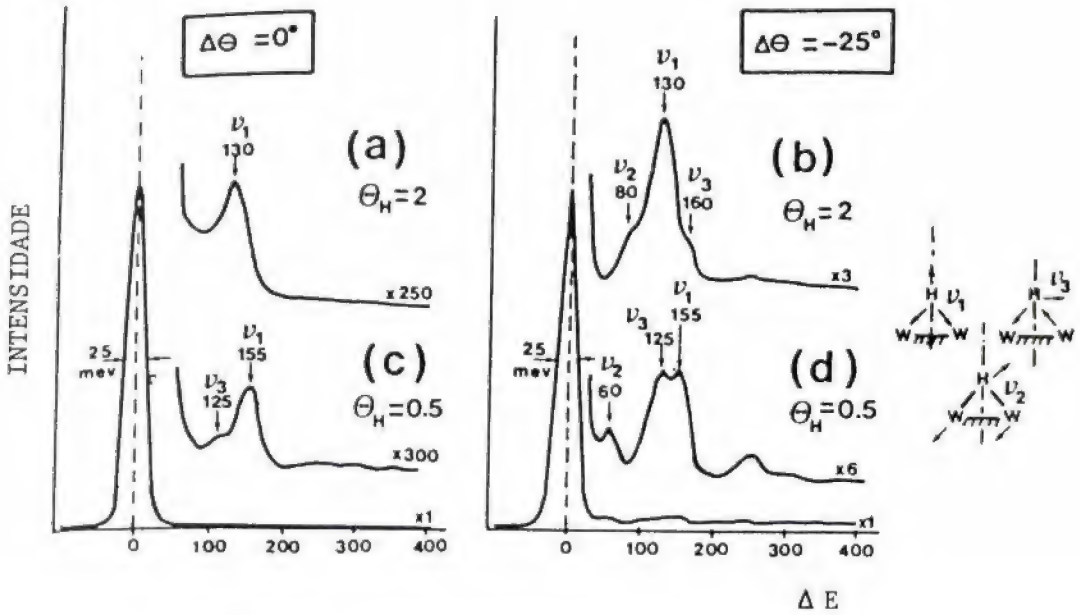


Fig. 27: Espectros vibracionais de hidrogénio adsorvido em W(100) obtidos com electrões de 5,5 eV incidindo segundo $\Theta = 60°$ (Reprodução de [33]).

modo de vibração ν_{C-C} polarizado paralelamente à superfície.

Os espectros da parte *c* da fig. (29) foram obtidos a uma temperatura superior à ambiente, com etileno adsorvido, ou após hidrogenação do acetileno adsorvido. A comparação destes com os anteriores evidencia uma modificação profunda das espécies adsorvidas. O modo de vibração independente da deuteração situa-se agora a 140 meV. A intensidade elevada do pico desta vibração C-C leva a supor uma orientação normal à superfície da ligação C-C. Isto significa que se deve ter realizado uma reacção em superfície, acompanhada da formação de uma espécie superficial estável.

Como se depreende dos exemplos citados, é possível observar directamente frequências de modos vibracionais em fase adsorvida, através da espectrometria de perda de energia de electrões lentos. Este facto, torna esta técnica útil na identificação da natureza dos complexos superficiais formados por quimidsorção, do número de ligação adsorvido-metal e da natureza dos locais de adsorção, etc.

Os exemplos que citámos dão uma ideia das capacidades da espectroscopia de perda de energia de electrões. Como eles abrangem apenas uma pequena gama de substâncias é conveniente referir neste momento alguns estudos envolvendo outros tipos de meios. Assim, assinalamos trabalhos sobre gases raros [15, 22, 60], metais alcalinos [15] e de transição [22, 64], semicondutores [22, 88], sais de halogéneos [12, 22, 86, 87] e óxidos [15, 22, 89]. Citamos, ainda o artigo de Raether [64] onde o autor apresenta, em forma de tabela, uma lista de referências a trabalhos envolvendo uma gama variada de elementos e compostos. Há, por fim, que realçar o facto da espectroscopia por impacte de electrões poder aplicar-se em microanálise desde que seja possível dispor de uma biblioteca de espectros de perda de energia de substâncias puras. É o que se depreende de trabalhos publicados sobre a análise de misturas gasosas [15] ou de amostras sólidas [90-92]. Os resultados obtidos com feixes de electrões, de energia suficientemente elevada para excitarem camadas internas, mostram que esta espectroscopia é particularmente interessante na detecção e análise de elementos leves. Nestes casos a sua sensibilidade é mesmo substancialmente maior do que a da microanálise por raios X [91]. A gama de perdas de energia explorável para fins quantitativos é, no entanto, limitada. Com efeito para valores de $\Delta E < 100$ eV os picos correspondentes a excitações de camadas internas, podem ser submergidos num fundo motivado pela difusão inelástica nos electrões de valência. Por outro lado, para perdas de energia muito elevadas ($\gtrsim 2000$ eV), a intensidade dos electrões difundidos é baixa misturando-se com o ruído da aparelhagem. Este tipo de problemas tem sido abordado em vários artigos, em que se descrevem métodos de tratamento dos espectros [65, 92-99] de forma a eliminar a contribuição do fundo e melhor evidenciar os picos que se pretende observar.

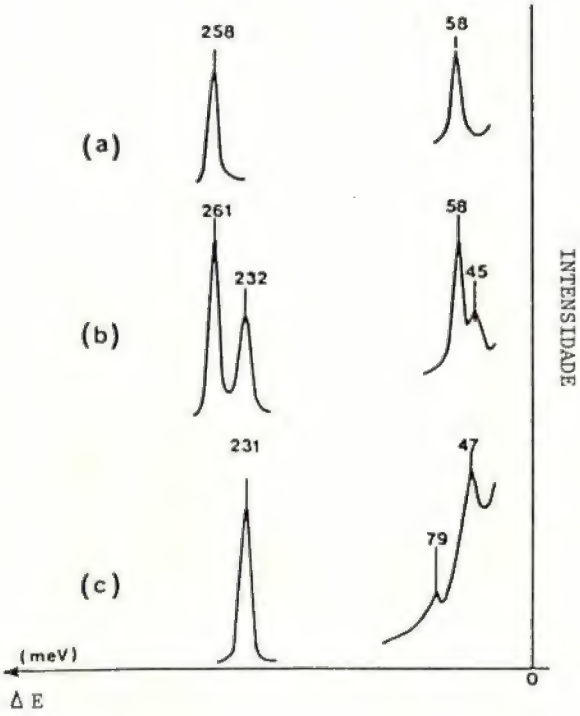


Fig. 28: Picos característicos dos picos vibracionais de CO adsorvido em P_t (111) e N_i (111). (Reprodução de [33]).

5 — CONCLUSÃO

Neste trabalho apresentámos alguns aspectos teóricos e experimentais característicos da espectroscopia de perda da energia de electrões difundidos inelasticamnte. Trata-se de uma espectroscopia complementar de outras melhor conhecidas, distinguindo-se-lhes delas por, num mesmo dispositivo, ser viável explorar uma larga gama contínua de energias (1 a 10^6 eV) e observar perdas de energia extendendo-se desde as dezenas dc meV às centenas de eV.

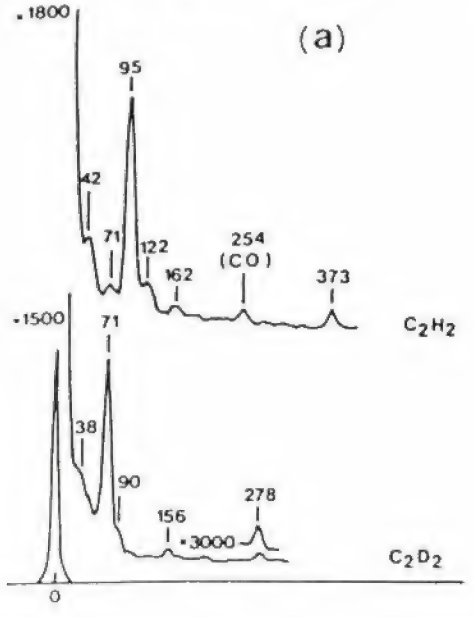
Os electrões incidentes podem classificar-se em três grupos consoante a sua energia cinética E_o: Electrões lentos (< 100 eV) aos quais não é aplicável a aproximação de Born, Electrões rápidos ($E_o > 100$ eV) passíveis de se lhe aplicar a aproximação óptica e possibilitando a excitação de electrões do cor e Electrões com energia intermédia e por isso talvez, menos interessantes.

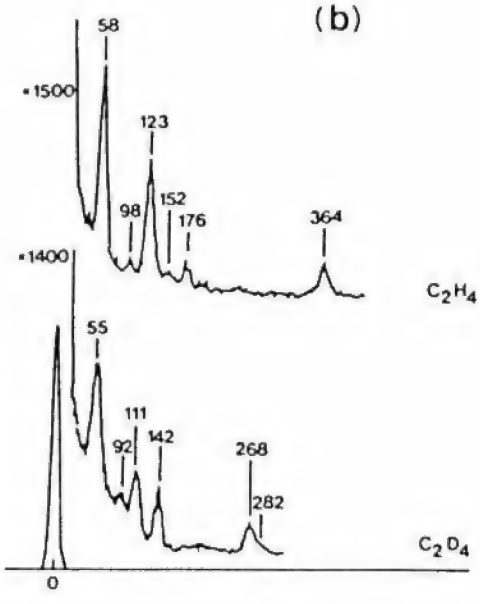
De entre os electrões lentos há que destacar os de energia inferior à dezena de eV, por permitirem observar perdas de energia da ordem das dezenas ou das centenas do meV, isto é, detectar e identificar modos

vibracionais de superfície. Nestas circunstâncias pode definir-se uma nova espectroscopia vibracional, particularmente bem adaptada ao estudo configuracional dos efeitos químicos estáveis, fixos à superfície de cristais metálicos. Torna-se por exemplo viável identificar complexos superficiais formados por quimisorção, definir o número de ligações adsorvido-metal e o local de adsorção, apreciar modificações de ligações químicas no interior das moléculas adsorvidas e consecutivas à quimisorção, etc. Um melhor aproveitamento da técnica neste domínio de perdas de energia, implica, no entanto, o desenvolvimento do estudo da interacção electrão-vibração. Uma outra particularidade dos electrões lentos, está no facto de induzirem a formação de plasmões de superfície, e excitações electrónicas de valência, não necessariamente concordantes com as regras de selecção óptica. Transições opticamente interditas por razões de spin ou de simetria são reveláveis nos espectros, dentro de uma gama de perdas de energia da dezena de eV. O decaímento dos plasmões de algumas dezenas de eV, pode ser seguido através da observação de estruturas, na parte do espectro referente à emissão secundária. Enfim, analisando perdas de energia entre 1 e 50 eV, é possível recolher informações complementares sobre a estrutura das substâncias.

Os electrões rápidos são especialmente interessantes, por provocarem a excitação dos electrões do cor e a observação de transições interbandas nos semicondutores. São características que permitem a utilização, da espectroscopia de difusão de electrões, em microanálise. Por outro lado, tendo em conta a aplicabilidade da teoria dieléctrica, é possível retirar dos espectros valores de constantes moleculares com interesse (absortividade, reflectividade, forças de oscilador ópticos).

A gama de energias incidentes intermédias não parece tão interessante. As excitações por elas produzidas seguem as leis da selecção óptica sobretudo quando analisadas segundo pequenos ângulos de difusão. A sua observação pode no entanto ser perturbada pela detecção dos electrões secundários.





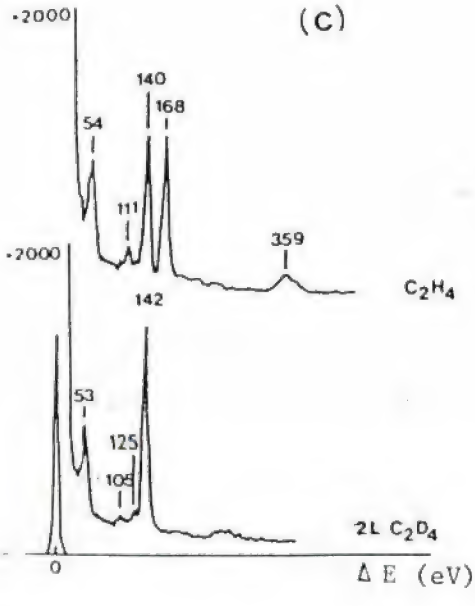


Fig 29: Espectros vibracionais de espécies estáveis formados sobre P_t (111). (Reprodução de [33]).

BIBLIOGRAFIA

1 — K. SIEGBAHN — Nobel Lecture UUIP — 1052 Institute of Physics Uppsala (1981).

2 — W. D. GROBMAN e E. E. KOCH — Research Report RC 6338 IBM Research Division (1976).

3 — C. E. BRION — MTP International Review of Science-Physical Chemistry, Series One **5**, 55 Butterworths Londres (1972).

4 — H. HINDAWI e FLOYD — F.-L. Ho ed «Applied Electron Spectroscopy for Chemical Analysis» J. Wiley New Iork (1982).

5 — D. W. TURNER, C. BAKER, A. D. BAKER C. R. BRUNDLE, «Molecular Photoelectron Spect ›scopy» Wiley London (1970).

6 — J. FRANCK e G. HERTZ, Verh. Deutsch.. Phys.. Ges., **16**, 457 (1914).

7 — A. M. BOTELHO DO REGO, M. REI VILAR e J. LOPES DA SILVA — Com. Cong. Ibérico de Espectroscopia Salamanca Outubro 1983 — Publicação interna do C. Q. F. M.

8 — T. A. CARLSON «Photoelectron and Auger Spectroscopy» Plenum Press New Iork (1975).

9 — H. V. BETHE, Ann. Phys. Lpz, **5**, 325 (1930).

10 — E. N. LASSETTRE, Rad. Res. Suppl. **1**, 350 (1959)

11 — H. M. B. BRONGERSMA TÉSE DOUT. UNIV. LEIDEN (1968).

12 — M. INOKUTI, Rev. Mod. Phys. **43**, 297 (1971)

13 — H. S. W. MASSEY e E. H. S. BURHOP «Electronic and Ionic Phenomena» Clarendon Press, Oxford (1969).

14 — R. A. BONHAM «Theory of Electron Impact Spectroscopy of Atoms and Molecules» Baltimore University Park Press (1971).

15 — R. J. CELOTTA e R. H. HUEBNER «Electron Spectroscopy Theory, Technique and Applications» **3**, 41 Ed. C. R. Brunde e A. D. Baker, Academic Press Londres, (1979).

16 — A. SKERBELE e E. LASSETRE, J. Chem. Phys. 42. 395 (1965).

17 — E. E. KOCH e A. OTTO, Chem. Phys. Lett. **12**, 476 (1972).

18 — C. E. KLOTZ, «Fundamental Processes in Radiation Chemistry» cap. 1 Ed. P. Auloss, Wiley, New York (1968).

19 — J. G. CARTER, T. M. JELINEK, R. D. BIRKHOFF, J. Chem. Phys. **44**, 2266 (1966).

20 — T. INAGAKI, E. T. ARAKAWA, R. N. HAMM e M. W. WILLIAMS, Phys. Rev. B **15**, 3243 (1977).

21 — N. SWANSON e C. J. POWEL, J. Chem. Phys **39**, 630 (1963).

22 — J. DANIELS, C. V. FESTENBERG, H. RAETHER e Z. ZEPPENFELD, Springer Tracks in Modern Physics Ed. G. Hohler **54**, 57 Springer Verlag, Berlin (1970).

23 — M. ISAACSON, J. Chem. Phys. **56**, 1803 (1972).

24 — M. ISAACSON, J. Chem. Phys. **56**, 1813 (1972.)

25 — J. J. RITSKO, L. J. BRILLSON, R. W. BIGELOW e T. S. FABISH, J. Chem Phys. **69**, 3931 (1978).

26 — J. J. RITSKO, J. Chem. Phys. **70**, 5343 (1979).

27 — L. G. CHRISTOPOROU. M. W. GRANT e D. L. Mc CORKLE, Adv. Chem. Phy. **36**, 413 (1977).

28 — V. I. OCHKUR, Zh. Eksp. Theor. Fiz. **45**, 734 (1963 Sov. Phys. JETP **18**, 503 (1964).

29 — V. I. OCHKUR e V. F. BRATTAEV, Opt. Spectr. **19**. 274 (1965).

30 — M. R. H. RUDGE, Proc. Phys. Soc. London **85**, 607 (1965).

31 — M. R. H. RUDGE, Proc. Phys. Soc. London **86**, 763 (1965).

32 — M. MATSUZAWA, J. Chem. Phys. **51**, 4705 (1969).

33 — J. C. BERTOLINI e J. ROUSSEAU, Ann. Physique **5**, 115 (1970).

34 — J. LOPEZ, J. C. BERTOLINI e J. ROUSSEAU, Le Vide **36**, 457 (1981).

35 — E. EVANS e D. L. MILLS, Phys. Rev. B **5**, 4126 (1972).

36 — D. ŠOKČVIĆ, Z. LENAC, R. BRAKO e M. SUNJIC, Z. Physik B **28**, 273 (1977).

37 — H. A. PEARCE e N. SHEPPARD, Surface Sci. **59**, 205 (1976).

38 — E. BARANGER, E. GERJUOY, Phys. Rev., **106**, 1182 (1957).

39 — W. HO, R. F. WILLIS e E. W. PLUMMER, Phys. Rev. Lett. **40**, 1463 (1977).

40 — J. W. DAVENPORT. W. HO e J. R. SCHRIEFFER, Phys. Rev. B, **17**, 3115 (1978).

41 — C. RAMSAUER, Ann. Physic, **64**, 513 (1921).

42 — G. J. SHULZ e R. E. FOX, Phys. Rev. **106**, 1179 (1957).

43 — J. KLEIN — Dout. d'Etat (2.ª tése) Univ. Strasbourg (1968).

44 — C. R. BROWN e M. D. MILLER, J. Chem. Phys. **42**, 681 (1965).

45 — E. H. VAN VEEN e F. L. PLANTEGA, Chem. Phys. Lett. **30**, 28 (1975).

46 — L. SANCHE e G. SHULZ, Phys. Rev. A **5**, 1672 (1972).

47 — L. SANCHE, J. Chem. Phys. **71**, 4860 (1979).

48 — A. KUPPERMANN e L. M. RAFF, Disc. Far. Soc. **35**, 30 (1963).

49 — W. M. FLICKER, O. A. MOSHER e A. KUPPERMANN, Chem. Phys. **30**, 307 (1978).

50 — L. M. HUNTER, D. LEWIS e W. H. HAMILL, J. Chem. Phys. **52**, 1733 (1970).

51 — E. C. BULLARD e H. S. W MASSEW, Proc. Roy. Soc. 570 (1931).

52 — A. L. HUGHES e J. H. Mc MILLER, Phys. Rev. **39**, 585 (1932).

53 — H. EHRHARDT e U. ERBSE, Zeits. Phys. **172**, 210 (1963)

54 — H. EHRHARDT e F. LINDER, Z. NATURF **22a**, 444 (1967).

55 — Y. BALLU, Relatório Interno C. E. A. Saclay (1968).

56 — Y. BALLU, Rev. Physique Appl. **3**, 46 (1968).

57 — F. H. READ, J. Sci. Inst. (J. Phys. E), **2**, 679 (1969).

58 — F. H. READ, J. Sci Inst. (J. Phys. E), **3**, 127 1970).

59 — J. A. PRESTON, M. A. HENDER e J. W. Mc CONKEY, J. Sci Inst. (J. Phys. E), **6**, 661 (1973).
Phys. E), **6**, 661 (1973).

60 — D. ROY — Tése Dout. Univ. Laval (1974).

61 — H. FROITZHEIM, Topics in Current Physics **IV**, cap. 6, Ed. H. Ibach, Springer-Verlag Berlin (1976).

62 — R. F. EGERTON «Analytical Electron Microscopy», p 235 Ed. R. H. Geiss, San Francisco Press, San Francisco (1981).

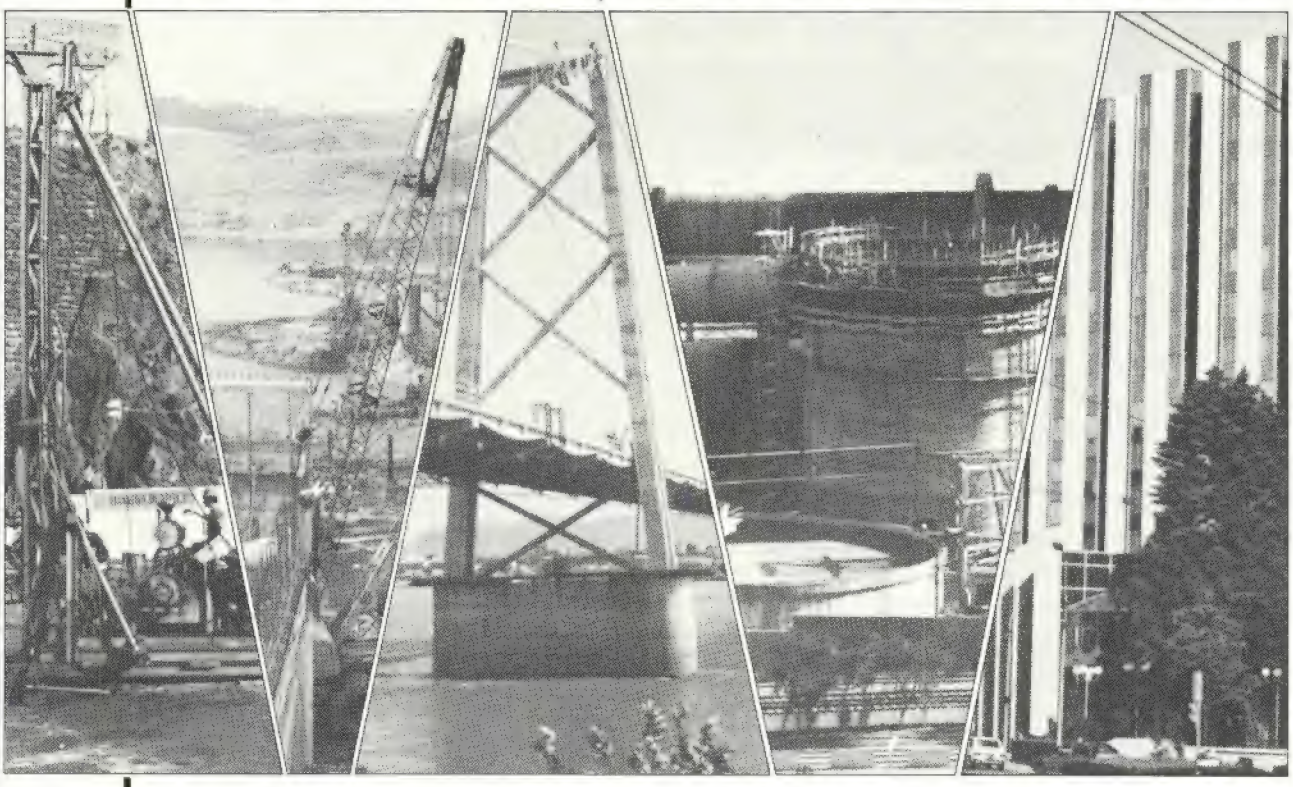
63 — R. F. EGERTON, Ultramicroscopy, **7**, 207 (1981).

64 — H. RAETHER «Excitation of Plasmons and Interband Transitions by Electrons», Springer Tracts in Modern Physic 88 Ed. G. Höhler Springer-Verlag Berlin (1980).

65 — M. REI VILAR, M. HEYMAN e M. SHOTT, Chem. Phys. Lett. **94**, 522 (1983).

66 — C. COLLIEX, O. L. KRIVANEK e P. TREBBIA, «Electron Microscopy and Analysis», Inst. Phys. Conf. Ser 61 cap. 4, Cambridge (1981).
67 — R. F. EGERTON e M. EGERTON, Scaninng Electron Microscopy part I (1983).
68 — R. N. COMPTON, R. H. HUEBNER, P. W. REINHARDT e L. G. CHRISTOPHOROU, J. Chem., **48**, 901 (1969).
69 — P. B. MERKEL e W. H. HAMILL, J. Chem. Phys. **55**, 1409 (1971).
70 — J. P. DOERING, J. Chem. Phys., **51**, 2866 (1969).
71 — J. P. DOERING, J. Chem. Phys., **67**, 4065 (1977).
72 — M. J. W. BONESS, I. W. LARKIN, J. B. HASTED e L. MOORE, Chem. Phys. Lett. **1**, 292 (1967).
73 — L. SANCHE e G. J. SCHULZ, J. Chem. Phys. **58**, 479 (1973).
74 — L. W. LARKIN e J. B. HASTED, J. Phys. B **5**, 95 (1972).
75 — J. J. RITSKO, E. J. MELE, A. J. HEEGER, A. C. Mac DIARMID e M. OZAKI, Phys. Rev. **44**, 1351 (1980).
76 — J. J. RITSKO. Materils Science VII, 337 (1981).
77 — N. UENO, A. OKAZAKI, Y. HAYASI e S. KIYONO, Chem. Phys. Lett. **42**, 119 (1976).
78 — N. UENO, S. KYONO e T. WATANABE, Chem. Phys. Lett. **46**, 89 (1977).
79 — N. UENO, T. FUKUSHIMA, K. SUGITA, S. KIYONO, K. SEKI e H. INOKUCHI, J. Phys. Soc. Japan **48**, 1254 (1980).
80 — K. SEKY, S. HASHIMOTO, N. SATO, Y. HARADA, K. ISHII, H. HASHIMOTO e J. KANBE, J. Chem. Phys. **66**, 3644 (1977).
81 — K. SEKI, T. HIROOKA, Y. KAMURA e H. INOKUCHI, Bull. Chem. Soc. Japan **49**, 904 (1976).
82 — M. OFRAN, N. ORON e A. WEINREB, J. Chem. Phys. **48**, 4805 (1968).
83 — F. I. VILESOV, A. A. ZAGRABSKII e D. A. SUKHOV, Soviet Phys. Sol. Stat. **11**, 2775 (1970).
84 — M. R. BARNES e R. F. WILLIS, Phys. Rev. Lett. **41**, 1729 (1978).
85 — M. FROITZHEIM, H. HOPSTER, H. IBACH e S. LEHWOLD, Appl. Phys. **13**, 47 (1977).
86 — R. D. BRIGANS, J. Phys. C. Solid Stat. Phys. **14**, 1053 (1981).
87 — R. D. BRINGANS e W. Y. LIANG, J. Phys. C: Solid Stat. Phys. **14**, 1065 (1981).
88 — H. IBACH, Phys. Rev. Lett. **27**, 253 (1971).
89 — H. IBACH, Phys. Rev. Lett. **24**, 1416 (1970).
90 — R. F. EGERTON, 37th Ann Proc. Electron Microscopy Soc. Amer., p. 128, Ed. G. W. Bailey, San António, Texas (1979).
91 — R. F. EGERTON, «Analytical Electron Microscopy», p. 154, Ed. R. H. GEISS San Francisco Press, San Francisco (1981).
92 — C. COLLIEX, Proc. 10th Int. Cong. Elect. Microscopy Hamburg (1982).
93 — W. M. MULAIRE e W. T. PERIA, Surf. Sci. **26**, 125 (1971).
94 — R. HESSE, U. LITMARK e P. STAIB, Appl. Phys. **11**, 233 (1976).
95 — D. C. JOY, R. F. EGERTON e D. M. MAHER, Scanning Elect. Microscopy p. 817 (1979) Sun Inc., AMF O'Hare, IL 60666, USA.
96 — S. SAITO, H. MAJIMA, K. HIGETA e T. ICHINOKAWA, J. Phys. Soc. Japan **50**, 3075 (1981).
97 — R. D. LEAPMAN e C. R. SWYT «Analytical Electron Microscopy», p. 164, Ed. R. H. Geiss, San Francisco Press Inc, San Francisco (1981).
98 — J. OLIVIER, S. KILANI e R. POIRIER, Appl. Surf. Sci., **8**, 353 (1981).
99 — R. SOPIZET, Le Vide, **36**, 475 (1981).

EM CADA OBRA ATINGIMOS SEMPRE "A MÁXIMA PROFUNDIDADE"



Afirmação fundamentada nas inúmeras obras executadas no País e no Estrangeiro.

... iniciámos a actividade em 1921, no campo da Geotecnia e da Engenharia de Fundações.

Em 1984, a experiência e reconhecido «know-how» a par da mais avançada tecnologia, colocam-nos em posição de merecido prestígio em todos os Sectores da Construção

... incluindo a Geotecnia e a Engenharia de Fundações.

TEIXEIRA DUARTE, LDA

LISBOA — Av. da República, nº 42 - 1094 LISBOA CODEX • Telef. 73 30 86 • Telex 18548 Tedex P
PORTO — R. Campo Alegre, nº 732 - 5º A - 4100 PORTO • Telef. 6 57 14 - 69 07 51 • Telex 27347 Tedex P

AÇORES • MADEIRA • MACAU • ANGOLA • VENEZUELA • MOÇAMBIQUE • ARGÉLIA

MODELAÇÃO DE TRANSISTORES BIPOLARES E MÓS DE POTÊNCIA

Excertos da obra científica do PROF. PEDRO LUÍS BORGES TEIXEIRA

Coligidos por **M.J.A. LANÇA, J.P.C. TEIXEIRA** e **J.J.L.C. FREIRE**

Centro de Electrónica Aplicada (INIC) e Dept. Eng. Elect. e de Comp. (IST)

RESUMO

O projecto de circuitos com dispositivos semicondutores de potência requer uma caracterização física correcta do seu desempenho; para tal, torna-se necessário desenvolver modelos analíticos de fácil inserção em simuladores de circuito. Neste artigo, reunem-se as principais contribuições científicas do Prof. Pedro Teixeira na modelação e simulação de transistores bipolares e MOS de potência. Os exemplos apresentados salientam a precisão dos modelos, a sua eficiência computacional e a sua utilidade para o projecto de circuitos.

ABSTRACT

The design of electronic circuits with semiconductor power devices quests for an accurate physical characterization of their performance. For this, analytic models that can be easily implemented in circuit simulators have to be derived. In this paper, the main scientific contributions of Prof. Pedro Teixeira in the area of bipolar and MOS transistors modelling and simulation are collected. Examples are presented that ascertain the accuracy of the models, their computational efficiency and their usefulness in circuit design.

NOTA PRÉVIA

Com esta publicação, dá-se cumprimento ao desejo manifestado pela Secção de Electrónica e pelo Departamento de Engenharia Electrotécnica e de Computadores do I. S. Técnico em assinalar de forma perdurável a importante obra científica do Prof. Pedro L. B. Teixeira.

Original recebido para publicação em 12/11/84.

1. INTRODUÇÃO

O projecto de circuitos electrónicos de potência com transistores bipolares de potência (TBP) torna necessária a simulação em computador do seu comportamento, para diferentes regimes de operação. A utilização de modelos *numéricos* para os TBPs exige usualmente custos computacionais elevados. Além disso, requer o conhecimento completo, físico e dimensional, do dispositivo, o que por sua vez envolve um programa de medidas extenso para dispositivos existentes, ou uma simulação precisa dos processos tecnológicos de fabrico na fase de projecto. Deste modo, a utilização de modelos *analíticos*, implantáveis em programas gerais de análise de circuitos, torna-se desejável.

Todavia, os modelos residentes nos simuladores de circuitos correntemente disponíveis referem-se a transistores de junção bipolares (TJB) de baixa potência, como os que são implantados em circuitos integrados monolíticos. Tais modelos não só descrevem dispositivos estruturalmente diferentes dos TBPs, como também não incluem os efeitos dos principais mecanismos internos de alto nível que condicionam e limitam o funcionamento em sinais fortes.

Uma parte importante do trabalho científico do Prof. Pedro Teixeira incidiu na caracterização física aprofundada de tais mecanismos internos, com vista à sua formulação, e no desenvolvimento de uma hierarquia de modelos de circuito para o TBP de fácil inserção em simuladores de circuitos existentes. Além do mérito das contribuições originais na formulação e interpretação física dos fenómenos que caracterizam o funcionamento dos TBPs, deve salientar-se o modo

particularmente bem sucedido como o autor assegurou a consistência interna das hipóteses que servem de base aos modelos para os diferentes níveis hierárquicos.

Neste artigo, descrevem-se na Secção 2 as principais contribuições científicas do Prof. Pedro Teixeira para a modelação dos fenómenos físicos que condicionam o comportamento de TBPs. A caracterização da hierarquia de modelos desenvolvidos e a sua implementação no simulador de circuitos SPICE2 constitui o objecto da Secção 3. Na Secção 4 demonstra-se como a estratégia de modelação de TBPs se pode generalizar e aplicar a dispositivos MOS (metal-óxido-semicondutor) de potência. Finalmente, apresentam-se na Secção 5 alguns exemplos de simulação de circuitos com TBPs, que evidenciam a eficiência e a precisão dos modelos e a sua utilidade no projecto de circuitos.

2. MODELAÇÃO DOS FENÓMENOS FÍSICOS CARACTERÍSTICOS DOS DISPOSITIVOS BIPOLARES DE POTÊNCIA

2.1. Eficiência de Injecção para Níveis de Injecção Elevados

Diversos autores apresentam a formulação das equações de transporte no semicondutor como função explícita do mecanismo de transporte (deriva ou difusão) e do seu peso relativo, consoante o nível de injecção dos portadores de carga. Contudo, o autor desenvolveu a formulação das equações de transporte em termos dos *quase-potenciais de Fermi*, o que lhe permite caracterizar a operação de uma junção pn em regime de alto nível sem fazer intervir explicitamente as equações de transporte.

Utilizando a aproximação regional de Schokley [1] e admitindo o quase-equilíbrio na região de transição da junção, verificou que o produto (pn) não depende da tensão aplicada à junção, V_J, mas da diferença dos quase-níveis de Fermi referentes a portadores maioritários entre as fronteiras de região de transição, $\Delta\Phi_{PN}$. Uma vez que só se verifica $V_J \simeq \Delta\Phi_{PN}$ em baixo nível, propõe a utilização de $\Delta\Phi_{PN}$ como variável no modelo da junção, e relaciona $\Delta\Phi_{PN}$ com a tensão exterior aplicada, V_A, e com as quedas de tensão ohmicas ao longo das regiões quase neutras n e p, V_Ω, através de (ver fig 1)

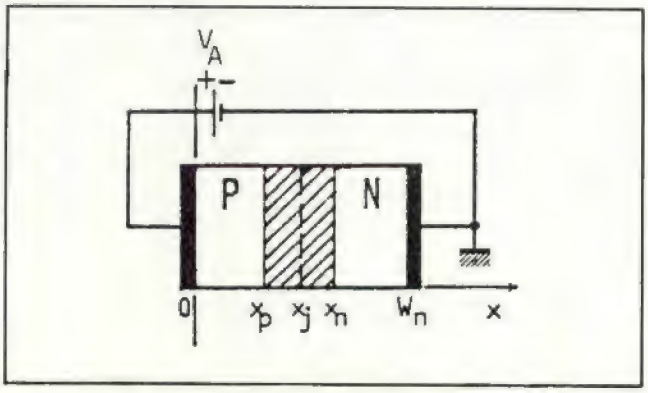


Fig. 1 — Junção pn polarizada directamente

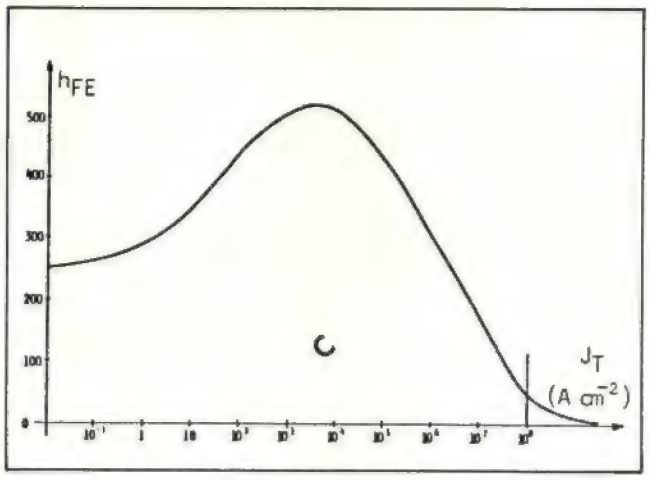


Fig. 2 — Variação de h_{FE} com J_T

$$V_A = V_J + V_\Omega = \Delta\Phi_{PN} - V_T \ln\left[n(x_N)/n_{N_0}\right] - V_T \ln\left[p(x_P)/p_{P_0}\right] + V_\Omega \quad (1)$$

Esta formulação permitiu demonstrar a incorrecção de assumir como válidas as condições fronteiras de Fletcher [2] em alto nível, o que tem sido admitido para justificar (infundadamente) o estabelecimento de modelos empíricos; permitiu adicionalmente generalizar as condições de Fletcher para qualquer nível de injecção.

A eficiência de injecção da junção do emissor de um TBP e a sua dependência da excitação exterior (corrente que a percorre e tensão aplicada) determinam, em estruturas típicas, a lei de variação do ganho de corrente do TBP, h_{FE}, com a corrente de colector. O Prof. Pedro Teixeira propôs uma nova relação para a eficiência de injecção de uma junção que, para uma junção p^+n se escreve $\gamma = J_p/J$, $J = J_n + J_p$, como [3]

$$\gamma = \gamma(y,a) = \frac{y + (L_{np}/W_n)a}{(b+1) + (L_{n_p}/W_n)a} \quad (2)$$

em que

$$a = 2 - \frac{N_D}{p'(x_n)} \ln\left[1 + \frac{p'(x_n)}{N_D + p_{no}}\right] \quad (3)$$

$$y = \frac{n'(x_p)}{p'(x_n)} \simeq \frac{n(x_p)}{p(x_n)} = \frac{N_D}{N_A} + \exp\left(\frac{V_A}{V_T}\right) \quad (4)$$

$b = D_n/D_p = \mu_n/\mu_p$ e os demais símbolos retêm o seu significado usual. O parâmetro *a* reflecte o nível de injecção na região n (única onde poderá ocorrer injecção de alto nível), variando entre 1 (baixo) e 2 (alto nível). Atendendo a que $J = J_{np}/(1-\gamma)$, e que $J_{np} \simeq q\, D_{np}\, n'(x_p)/L_{np}$, pode obter-se a característica estática I(V) da junção exprimindo *a* e y (ou $n'(x_p)$ e $p'(x_n)$) em termos de V_A.

Para um TBP, o ganho de corrente em regime estático, h_{FE}, pode escrever-se

$$h_{FE} \simeq \frac{J_p}{J_n} = \frac{\gamma}{1-\gamma} \qquad (5)$$

o que permite obter uma lei de variação h_{FE} ($J = J_T$) como a ilustrada na fig. 2. A lei de variação proposta permite verificar que γ passa uor um máximo, em regime de alto nível, o que está em harmonia com o facto de γ crescer (a $y = c^{te}$) com a e decrescer (a $a = c^{te}$) com y. Permite ainda pôr em evidência o transporte adicional por deriva de lacunas na região n, em alto nível.

2.2. Recombinação Directa no Emissor

No funcionamento de um TBP, o nível de injecção condiciona o peso relativo de diversos mecanismos de recombinação sobre o comportamento terminal do dispositivo. Assim, para níveis de injecção crescentes, tem-se sucessivamente (1) a recombinação SRH [4] (Shockley-Read-Hall), com um único nível de armadilhas, na região de transição da junção do emissor, (2) a recombinação por choque (Auger) [5] no corpo do emissor e (3) a recombinação SRH directa no volume da base e no epicolector [6]. O efeito da recombinação Auger no emissor faz-se sentir mesmo para a operação em baixo nível. Deste modo, tem de ser incluído na modelação da eficiência do emissor, uma vez que condiciona o valor da corrente de portadores minoritários injectada no emissor. A recombinação Auger conduz a tempos médios de vida (ou a comprimentos de difusão, L_{pE}) muito reduzidos. O autor propôs incluir a modelação do efeito Auger através de um factor correctivo, b_{RE}, a ser aplicado à corrente minoritária do emissor, dado por

$$b_{RE} = \frac{I_{pE}}{I_{BD}} = \frac{Q_{EO}}{qA_E\ W_E N_D(0)} \left(\frac{W_E}{L_{pE}}\right) \mathrm{cth}\left(\frac{W_E}{L_{pE}}\right) \qquad (6)$$

em que Q_{EO} é o integral da concentração na região neutra do emissor. Deste modo, h_{FE}, calculado com base no quociente dos números de Gummel do emissor e da base, vem reduzido de b_{RE} relativamente ao valor calculado sem este efeito.

2.3. Modelo de Comando pela Carga Integral Generalizada

Num TJB de baixa potência, o integral da carga de base associada com o correspondente perfil de impurezas, condiciona de forma dominante o comportamento do dispositivo. A percepção deste facto sem dúvida contribuiu para o estabelecimento da relação de Gummel [7] e do modelo de Gummel e Poon [8], que procura descrever o efeito de alto nível através da variação das correntes terminais com a carga da base. Essa modelação é feita para a componente de transporte dominante de corrente entre o emissor e o colector; Gummel e Poon introduzem em seguida, de forma empírica, a corrente de base como perturbação das componentes de transporte.

Todavia, o modelo de Gummel e Poon, implantado nas bibliotecas de simuladores de circuito como o SPICE 2 [9], é insuficiente para modelar correctamente o funcionamento de TBPs. Isto dá-se especialmente para os regimes de saturação e quase-saturação, e deve-se à influência notável da carga integral associada à região do *colector*. O autor propôs assim uma generalização da relação de Gummel, em que a carga integral da base se encontra substituída pela soma das cargas integrais referentes às regiões que formam a junção, q_{BE} ou q_{BC}, normalizadas em relação às respectivas cargas maioritárias na situação de equilíbrio, Q_{pBo}, Q_{nEo} e Q_{nCo}. As expressões propostas para as densidades de corrente longitudinais de electrões e de lacunas, nas fronteiras das regiões de transição, permitem *determinar* a densidade de corrente de base (ver Tabela 1 e fig. 3).

A generalização proposta pelo Prof. Pedro Teixeira, para além de conter, como caso particular, a formulação de Gummel, permite evidenciar (1) a não simetria do processo de transporte na base, sugerida por Gummel e que só é válida quando as cargas associadas a E e C são desprezáveis, (2) a expressão analítica das componentes da corrente de base, em alto nível, (3) a inclusão dos termos de recombinação, numa base não fenomenológica, (4) a extensão do efeito de Early em alto nível, (5) o mecanismo de retroacção através da modulação do volume de recombinação na base, e (6) a extensão da formulação do modelo à região do epicolector, o que torna possível descrever correctamente o desempenho do TBP em regimes de saturação.

2.4. Desfocalização do Emissor

A queda de tensão transversal na base, geralmente elevada na estrutura planar, típica dos transistores de potência para RF, provoca uma polarização decrescente da junção BE, a partir do contacto de ligação da base. Deste modo, para um dada tensão exterior V_{BE}, as correntes I_B e I_C apresentam valores inferiores aos correspondentes à polarização uniforme da junção.

EQUAÇÕES DO MODELO DE COMANDO PELA CARGA INTEGRAL GENERALIZADA

Para a caracterização deste fenómeno, ao contrário de Hauser [10], Webster [11], ou Rey [12], o autor

TABELA 1 - EQUAÇÕES DO MODELO DE COMANDO PELA CARGA INTEGRAL GENERALIZADA

$$J_{Ex} = -\frac{J_{BS}}{q_{BE}}\left\{1 + \frac{b+1}{b}\, q_{pE} + \frac{J_{ES}}{J_{BS}}\left[1 + (b+1)q_{nB}\right]\right\}\left(\frac{pn}{n_i^2}\right)_0 +$$

$$+\frac{J_{BS}}{q_{BE}}\left[1 + \frac{b+1}{b}\, q_{pE}\right]\left(\frac{pn}{n_i^2}\right)_{W_B} - \frac{1}{q_{BE}}\left(1 + \frac{b+1}{b}\, q_{pE}\right) \cdot$$

$$\cdot \left[1 + (b+1)\, q_{nB}\right]\left[(1-\lambda_B)\,\frac{\hat{Q}'_B}{\tau_B} + \lambda_E\,\frac{\hat{Q}'_E}{\tau_E}\right]$$

$$J_C(x) = \frac{J_{BS}}{q_{BC}}\left\{\left(1 + \frac{b+1}{b}\, q_{pC}\right) + \frac{J_{CS}}{J_{BS}}\left[1 + (b+1)q_{nB}\right]\right\}\left(\frac{pn}{n_i^2}\right)_{W_B} -$$

$$-\frac{J_{BS}}{q_{BC}}\left(1 + \frac{b+1}{b}\, q_{pC}\right)\left(\frac{pn}{n_i^2}\right)_0 + \frac{1}{q_{BC}}\left(1 + \frac{b+1}{b}\, q_{pC}\right) \cdot$$

$$\cdot \left[1 + (b+1)\, q_{nB}\right]\left[\frac{\hat{Q}'_B}{\tau_B}\lambda_B - (1-\lambda_C)\,\frac{\hat{Q}'_C}{\tau_C}\right]$$

$$J_B = J_{Cx} - J_{Ex}$$

em que

$$q_{BE} = 1 + q_{pE} + q_{nB} \qquad q_{nB} = \frac{Q'_{nB}}{\hat{Q}_{pB_0}} \quad ; \quad q_{pE} = \frac{Q'_{pE}}{Q_{nE_0}} \quad ; \quad q_{pC} = \frac{Q'_{pC}}{Q_{nC_0}}$$

$$q_{BC} = 1 + q_{nB} + q_{pC}$$

$$J_{BS} = \frac{q^2\overline{D_{nB}}\, n_{iB}^2}{\hat{Q}_{pB_0}} \qquad Q_{pB_0} = q\int_0^{W_{B_0}} N_{AB}(x)\,dx$$

$$J_{ES} = \frac{q^2\overline{D_{pE}}\, n_{iE}^2}{Q_{nE_0}} \qquad Q_{nE_0} = q\int_{-W_E}^{-W'_{E_0}} N_{DE}(x)\,dx$$

$$J_{CS} = \frac{q^2\overline{D_{nC}}\, n_{iC}^2}{Q_{nC_0}} \qquad Q_{nC_0} = q\int_{W'_{C_0}}^{W_C} N_{DC}(x)\,dx$$

$$(pn/n_i^2)_0 = \exp\left|\frac{\Delta\phi_{PN}}{V_T}\right|_0 = \exp(V_{BE}/V_T) \qquad \tau_B \simeq \tau_{nB} \simeq \tau_{pB}$$

$$\tau_E \simeq \tau_{pE} \simeq \tau_{nE}$$

$$(pn/n_i^2)_{W_B} = \exp\left|\frac{\Delta\phi_{PN}}{V_T}\right|_{W_B} = \exp(V_{BC}/V_T) \qquad \tau_C \simeq \tau_{nC} \simeq \tau_{pC}$$

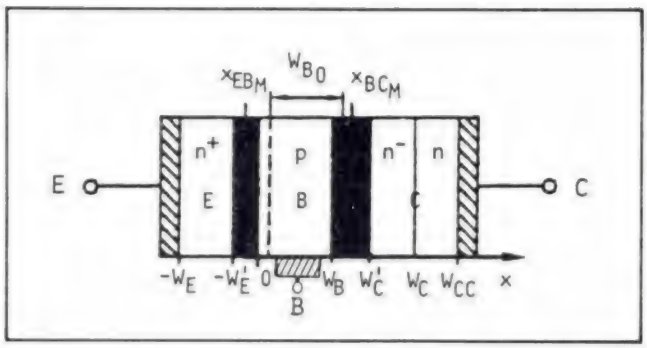


Fig. 3 — Representação esquemática dum transistor n^+pn^-n unidimensional

não estipula a geometria das linhas de corrente de base, pelo que os resultados obtidos são válidos para uma base não homogénea e incluem o efeito de modulação da condutibilidade da base, que ocorre em alto nível. No sentido de melhorar a simulação do regime dinâmico, e de conferir um carácter bidimensional ao funcionamento na quase-saturação, apresentou um modelo resultante da divisão tranversal da base em duas secções.

Modelo distribuído

A partir do modelo de carga integral demonstrou-se que a iluminação do colector pela corrente de transporte em baixo nível é reduzida duma quantidade $F_D(\Theta)$ *(factor de desfocalização)*, dado por

$$F_D(\Theta) = \frac{I_{TD}}{I_{TD}^*} = \frac{\operatorname{sen}\Theta \cos\Theta}{\Theta} \qquad (7)$$

em que o parâmetro Θ é função da corrente directa de base I_{BD}, pesada pela corrente de referência $I_{RO} = 2V_T/R_{BO}$, de acordo com:

$$\Theta \operatorname{tg}\Theta = \frac{I_{BD}}{I_{RO}} = k \qquad (8)$$

Estando a corrente de transporte directa I_{TD} expressa em termos da correspondente corrente do modelo de carga integral sem desfocalização ($R_{BO}=0$), a modelação deste efeito é realizada através de um termo adicional àquele modelo. Em conformidade ,a sua implantação em programas de análise de circuitos que disponham de modelo de carga integral é trivial [13].

Para correntes elevadas, a concentração de electrões injectados pelo emissor na base torna-se comparável à concentração de lacunas em equilíbrio. Por conseguinte, a resistência tranversal da base descresce para valores crescentes de I_{BD} *(modulação da condutibilidade da base)*. Trata-se de um efeito que contraria e atenua a desfocalização de emissor, em alto nível.

O Prof. Pedro Teixeira considerou a carga da base normalizada, q_B, constante segundo a direcção transversal da base e definida pelo modelo de carga integral sem desfocalização; deste modo, a introdução da modulação da condutibilidade da base num transistor com desfocalização reduz-se à substituição em (8) da corrente de referência em baixo nível I_{RO} por $I_R = 2V_T/R_B$ onde R_B é a resistência da base em alto nível, definida como:

$$R_B = \frac{R_{BO}}{q_B} \qquad (9)$$

Refira-se que a técnica de modelação utilizada permite uma generalização fácil para outras regiões de funcionamento, nomeadamente a zona inversa *(desfocalização de colector)* e a de saturação.

Para verificar a hipótese que conduziu a (9), o autor recorreu à simulação dos efeitos bidimensionais por um modelo em cadeia de elementos concentrados. Para tanto, considerou-se o dispositivo dividido num número elevado de secções, ao longo da dimensão transversal (fig. 4). Na figura 5 apresenta-se a comparação entre as características normalizadas ($V_n = V/V_T$, $I_n = I\,R_{BO}/V_T$, $R_n = R/R_{BO}$), $I_C(V_{BE})$ obtidas para o transistor 2N2222 a partir do modelo distribuído (7-9) e do modelo de elementos concentrados com 100 secções.

Modelo de elementos concentrados — 2 secções

Na simulação do regime dinâmico, a capacidade do programa de análise de circuitos e o tempo de computação vão limitar o número de secções a utilizar pela representação de elementos concentrados. Em conformidade, o Prof. Pedro Teixeira estabeleceu um modelo

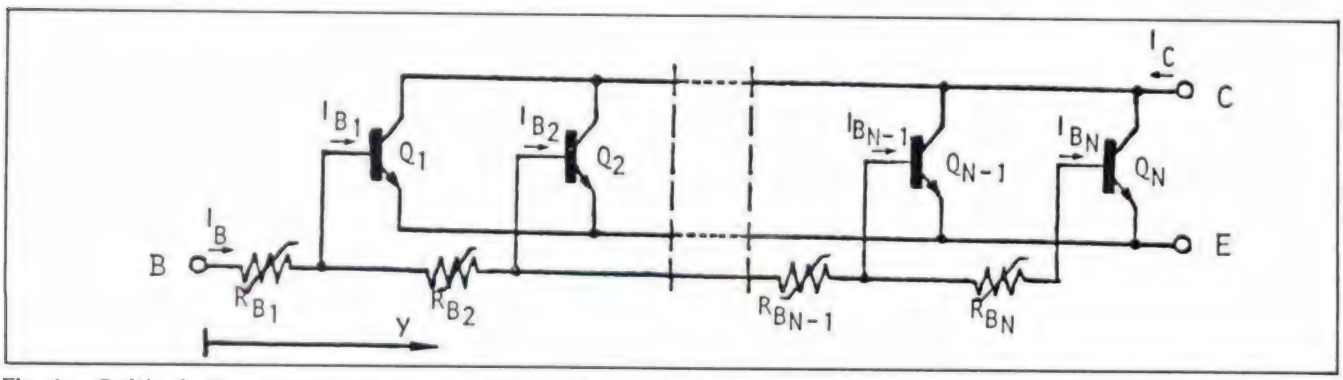


Fig. 4 — Cadeia de N secções — com modulação de condutibilidade da base

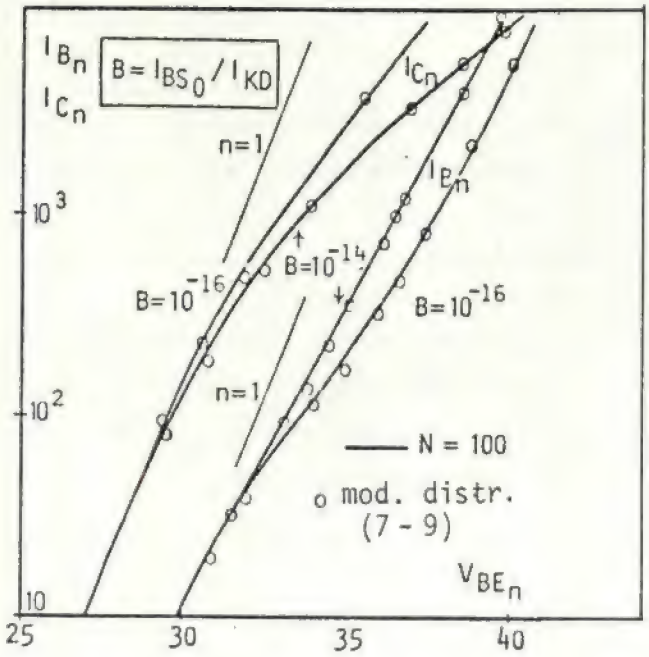


Fig. 5 — Características normalizadas $I_C(V_{BE})$ e $I_B(V_{BE})$ com modulação da condutibilidade da base

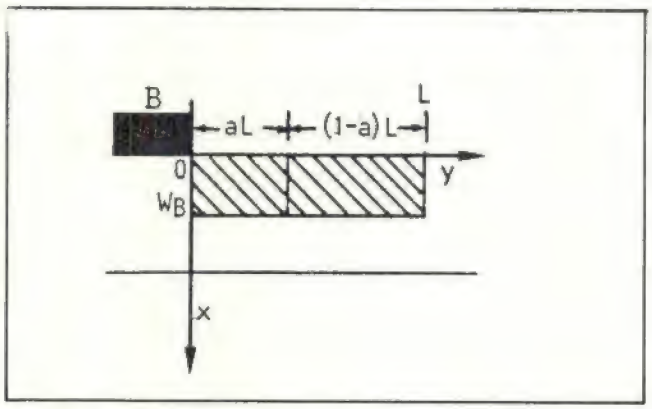


Fig. 6a — Partição em duas secções transversais

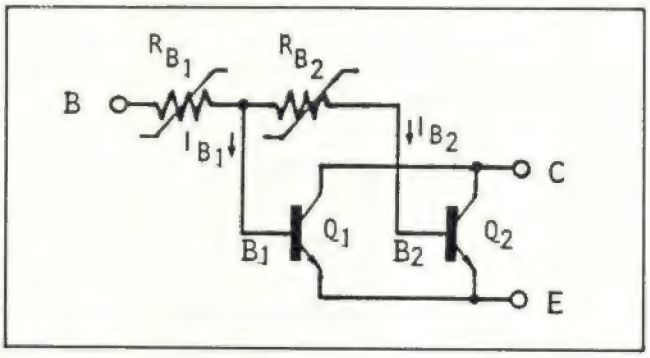


Fig. 6b — Esquema de princípio

de duas secções que verificou conduzir a boas aproximações da solução exacta (fig. 6). Por comparação com a resposta em regime transitório, dum modelo distribuído aproximado por um número elevado de secções, definiu-se um critério para a definição do parâmetro de partição a ($a \simeq 0.15 - 0.30$).

2.5. Efeitos do Epicolector

Os efeitos associados à região do colector são geralmente dominantes na operação em alto nível dos TBPs. No seu funcionamento como elemento do circuito, verifica-se a existência de uma zona intermédia de quase-saturação (ou saturação parcial) nas características estáticas de saída, não prevista pelo modelo de carga integral.

Há dois efeitos interactuantes em alto nível que influenciam o comportamento do TJB na região de quase-saturação: a penetração da região efectiva da base para o interior do epicolector n e a desfocalização do emissor já referida atrás. As características vincadamente bidimensionais do fenómeno de desfocalização de emissor arrastam consigo a necessidade de conduzir também o estudo do fenómeno de alargamento de base numa perspectiva bidimensional, em especial para a correcta modelação de regimes transitórios. O modelo de duas secções tranversais proposto pelo autor revelou-se, todavia, suficientemente preciso para a caracterização em vista. No entanto, a modelação por uma única secção conduz também a resultados com precisão suficiente na simulação e é normalmente adoptada por razões de eficiência de computação.

Deste modo, o alargamento da região de base efectiva, provocada pela injecção de portadores minoritários no epicolector n^-, é o fenómeno dominante da quase-saturação. Ele produz essencialmente três efeitos na operação do dispositivo: a modulação da resistência de corpo do epicolector, a redução do ganho de corrente h_{FE} e, para o regime dinâmico, os efeitos relacionados com o armazenamento de cargas no epicolector.

Resistência do epicolector

A partir das equações de transporte no epicolector, suposto dividido em duas regiões, uma de injecção ($o - x_i$) e outra de condução ($x_i - W_C$), onde x_i é definido a partir da condição de equilíbrio $p(x_i) = n_i^2/N_{DC}$, o autor obteve a importante relação:

$$V_{CB} = I_C R_{CO} - K_C \left[\exp(V_{BCj}/V_T) - 1 \right] - V_{BCj} \qquad (10)$$

onde $R_C = 2V_T\,(n_i/N_{DC}^2)$ e R_{CO} é a resistência ohmica do corpo do epicolector.

Em termos de implantação num programa de análise de circuitos, a expressão (10) corresponde a uma malha com um TJB elementar (V_{BCj}), uma resistência ohmica R_{CO} e a uma resistência não linear de colector simulada por um gerador comandado por V_{BCj}.

Ganho de corrente h_{FE}

Dois mecanismos são responsáveis pelo decréscimo do ganho de corrente na quase-saturação: o aumento

da carga de portadores maioritários na base, devido ao alargamento, e a recombinação no colector.

Sendo o primeiro mecanismo responsável por um decréscimo ΔI_C da corrente de colector e o segundo pela corrente inversa de base I_{BI}, o ganho de corrente h_{FE} é dado por:

$$h_{FE} = h_{FE_D} \left[\frac{1-(\Delta I_C/I_{TD})}{1+(I_{BI}/I_{BD})} \right] \qquad (11)$$

Estes efeitos foram introduzidos no modelo global de uma forma conspícua. Para tanto, consideraram-se correntes aditivas ou subtractivas que incidem na corrente total de colector, relativamente ao valor previsto pelo modelo de transporte em baixo nível (I_{TD}, I_{BD}) [14].

Regime dinâmico

Para a descrição do regime dinâmico na quase-saturação, incluiu-se um termo adicional na corrente de base, que exprime a variação no tempo da carga armazenada no epicolector $Q_{pC}(t)$. Há portanto que introduzir no modelo um gerador adicional entre base e colector, que fornece a corrente:

$$\Delta i_B = -\Delta i_C = \frac{dQ_{pC}(t)}{dt} \qquad (12)$$

Para a caracterização de $Q_{pC}(t)$ foi adoptada a aproximação de comando pela carga. Foi também introduzida uma aproximação linear para sinais fracos a partir da relação:

$$q_c = -C_S v_{cb} + \tau_{TC} i_c \qquad (13)$$

onde os parâmetros τ_{TC} e C_S são dependentes da polarização (I_C, V_{CB}).

3. MODELO PARA O TBP

3.1 Hierarquia de modelos

A partir da caracterização com base física dos efeitos de alto nível referida na secção anterior, o Prof. Pedro Teixeira desenvolveu um modelo analítico para o TBP para implantação no programa para simulação de circuitos SPICE 2 ou similares. O modelo foi inserido sob a forma de um circuito equivalente constituído por diversos subcircuitos separáveis, estando cada um em princípio ligado à caracterização de um efeito de alto nível.

Tornou-se assim possível conceber uma hierarquia de modelos, de complexidade crescente, com base na sobreposição (da incidência parcial) dos mecanismos físicos mais relevantes no funcionamento em alto nível.

NÍVEL	EFEITOS
I	Acção elementar do transistor Armazenamento de cargas na base Efeitos parasitas laterais
II	Nível I Injecção em alto nível (ambipolar) na base Armazenamento de cargas no emissor e colector Componentes de recombinação explicitadas Modulação do tempo de trânsito
III	Nível II Efeitos estáticos e dinâmicos do colector na saturação parcial e completa Quedas de tensão internas Desfocalização de emissor em alto nível Disrupção Simulação bidimensional por secções transversais

TABELA 2

Estes mecanismos encontram-se ligados entre si, e a sua ocorrência depende das condições exteriores de polarização. Os níveis hierárquicos adoptados (I, II e III) correspondem a um certo compromisso entre a verosimilhança do modelo, a complexidade da implantação e o tempo de cálculo associado à simulação em computador. A repartição dos diferentes efeitos por nível de modelação está descrita na Tabela 2.

As expressões mais relevantes para a caracterização dos referidos efeitos estão, por sua vez, sumarizadas na Tabela 3. Esta tabela inclui também as relações referentes ao transistor elementar (nível I), o qual funciona como elemento de ligação na modelação parcial daqueles efeitos. (Considera-se a operação na zona directa).

Uma estatística da hierarquia proposta, referente a um circuito padrão (inversor com carga RL), é apresentada na Tabela 4. No sentido de melhorar a eficiência da simulação, o Prof. Pedro Teixeira propõe ainda a adopção de um macromodelo funcional [13] que contempla, em particular, a operação na saturação.

3.2. Parâmetros de limiar

No sentido de obter resultados consistentes, pode efectuar-se uma selecção prévia do nível do modelo a adoptar através da aplicação de regras expeditas de dimensionamento e projecto. Este processo de escolha pode porém sistematizar-se a partir da introdução de

I	II	III		
TRANSISTOR ELEMENTAR	INJECÇÃO EM ALTO NÍVEL NA BASE (ANB)	CONCENTRAÇÃO DE EMISSOR (CE)	QUASE-SATURAÇÃO (QS) $\lvert 0 < V_{CB} < I_{TDQS} R_{CO} \rvert$	DISRUPÇÃO DIRECTA (X) $\lvert K_X V_B < V_{CB} - V_B \rvert$
$I_{TD_I} = I_{SO} \exp\left(\frac{V_{BE}}{V_T}\right)$	$I_{TD_{II}} = I_{SO} \frac{1}{q_B} \exp\left(\frac{V_{BE}}{V_T}\right)$	$I_{TD_{CE}} = I_{TD_{II}} F_D(\theta)$	(*) $I_{TD_{QS}} = \frac{I_{SO}}{q_B + K_D q_{pC}} \exp\left(\frac{V_{BE}}{V_T}\right)$	(*) $I_{TD_X} = I_{TD_{II}} (1 + F_{AC})$
$I_{BD_I} = \frac{I_{TD_I}}{\beta_{DO}}$	$I_{BD_{II}} = I_{TD_{II}} \frac{1}{\beta_D} (q_{B_D} + b q'_{nB})$	$I_{BD_{CE}} = I_{BD_{II}} F_D(\theta)$	(*) $I_{BD_{QS}} = I_{BD_{II}} + I_{BI}$	(*) $I_{BD_X} = I_{BD_{II}} + F_{AC} I_{TD_{II}}$
$h_{FE_I} = \beta_{DO} = \frac{GU_E}{GU_B}$	$h_{FE_{II}} = \beta_D \frac{1}{q_{B_D} + b q'_{nB}}$	$h_{FE_{CE}} = h_{FE_{II}}$	$h_{FE_{QS}} = \beta_D \frac{1}{(q_B + K_D q_{pC})(1 + \frac{I_{BI}}{I_{BDQS}})}$	$h_{FE_X} = h_{FE_{II}} \frac{1 + F_{AC}}{1 + h_{FE_{II}} F_{AC}}$
$I_{SO} = \frac{q^2 D_{nB} n_{iB}^2 A_E^2}{Q_{BO}}$	$q_B = \frac{q_{BO}}{2} + \left[\left(\frac{q_{BO}}{2}\right)^2 + q_T\right]^{\frac{1}{2}}$ $q_{BO} = 1 + \frac{V_{CB}}{V_{AI}}$; $q'_{nB} = \frac{I_{TD}}{I_{KD}}$ $q_T = \frac{I_{SO}}{I_{KD}} \exp\left(\frac{V_{BE}}{V_T}\right)$ $I_{KD} = \frac{Q_{BO}}{\tau_{TBD}} = \frac{Q_{BO}}{W_B^2} 4 D_{nB}$	$F_D(\theta) = \frac{\operatorname{sen}\theta \cos\theta}{\theta}$ $\theta \operatorname{tg}\theta = \frac{I_{BD_{CE}}}{I_R}$ $I_R = \frac{2V_T}{R_B}$ $R_B = \frac{R_{BO}}{q_B}$	$q_{pC} = \frac{Q_{pC}}{Q_{BO}}$ $Q_{pC} = \frac{q^2 \overline{D_{nC}} P_{QC}^2 A_E^2}{I_{TD_{QS}}} \exp\left(\frac{2V_{BCJ}}{V_T}\right)$ $I_{BI} = \frac{Q_{pC}}{\tau_C}$ (*) Afectadas eventualmente de $F_D(\theta)$	$F_{AC} = K_1 \exp\left(K_2 \frac{V_{CBJ}}{V_B}\right)$

TABELA 3

Nível	Nº nós internos	Nº de relações não lineares	Nº de parâmetros	Nº médio de iterações		Tempo médio de CPU (s)	
				DC	TR	DC	TR
I	8	6	15	10	12	0.3	0.5
II	16	16	23	30	50	0.8	1.0
III	54	29	39	50	70	2.0	2.5

TABELA 4

parâmetros de limiar exclusivamente dependentes da estrutura do dispositivo. Os valores destes parâmetros, determinados com base na caracterização dos efeitos a que dizem respeito, fixam um limite inferior (no domínio das variáveis eléctricas aos terminais) para uma incidência notável do respectivo efeito quando considerado em separado.

A determinação da hierarquia requerida para o modelo completo do TBP é imediata no caso da separação pronunciada dos valores dos parâmetros de limiar. Por exemplo, se $I_{ANB} < I_C < I_{QS} < I_{CE}$, as características aos terminais nestas condições de funcionamento vão reflectir, de forma predominante, os efeitos de injecção de alto nível na base, nomeadamente quanto à dependência de $I_{TD}(V_{BE})$ e $h_{FE}(V_{BE})$. Pode, por conseguinte, empregar-se o modelo de nível II, na simulação do seu comportamento num circuito de aplicação em que se verifiquem a priori aquelas desigualdades.

No entanto, no funcionamento dum dispositivo real, vai ocorrer a interacção dos diversos efeitos, a qual assume fundamentalmente dois aspectos distintos: fora da saturação ou da quase-saturação, há sobreposição

de CE e ANB, que se pode caracterizar de forma unidimensional por uma relação do tipo $I_{CE}=\beta_D I_{RO}$ para a componente directa de transporte. A partir do limiar da entrada na quase-saturação (na periferia da base) ocorre *quase-saturação parcial*, que requer uma caracterização bidimensional. A condição de ocorrência da quase-saturação parcial foi verificada como sendo $I_C > I'_{QS} = F_D\ I_{QS}$, em que F_D é o factor de desfocalização e I_{QS} a corrente limiar de quase-saturação. A região transversal quase-saturada passa por um valor máximo, tendendo assintoticamente para zero. O estudo numérico do modelo bidimensional permite concluir que aquele máximo pode ser igual ou maior que a dimensão transversal do emissor. No caso de $\gamma_Q \geqslant 1$ (quase-saturação completa), é válida a descrição unidimensional. Para valores crescentes de I_C tem-se portanto a seguinte sucessão:

— $I_C < I'_{QS} \rightarrow$ zona activa directa;
— $I_C \geqslant I'_{QS} \rightarrow$ zona de quase-saturação **parcial** ($\gamma_Q < 1$);
— eventualmente (caso $\gamma_Q \geqslant 1$), uma zona intermédia de saturação completa;
— uma região assintótica de quase-saturação parcial ($\gamma_Q \rightarrow 0$).

Concluído assim que a quase-saturação do dispositivo é parcial ao longo de uma faixa extensa de valores (I,V), foi possível estabelecer, para o nível III, a hierarquia de modelos da Tabela 5 (não considerando a disrupção).

O modelo do nível III.3 pode incluir apenas QS, uma vez que se trata do efeito dominante para aquela faixa de correntes. Deve no entanto referir-se que, em muitos casos, o modelo unidimensional EC + QS + ANB assegura uma caracterização suficientemente precisa, em especial quando a estrutura do dispositivo conduz a valores pouco elevados da resistência transversal da base em equilíbrio.

3.3 Caracterização dos modelos. Determinação dos parâmetros

Os parâmetros de implantação dos modelos analíticos apresentados atrás encontram-se ligados à descrição física de um certo número de efeitos. A sua determinação pode ser efectuada:

— com base na caracterização fina, física e dimensional da estrutura;
— a partir de um programa consistente de medidas (estáticas e dinâmicas) aos terminais do dispositivo real encapsulado ou directamente sobre a pastilha.

A incidência dum ou doutro modo vai depender do critério da utilização dos modelos: em circuitos de aplicação, no projecto de dispositivos ou no controlo de processos. Nos trabalhos do Prof. Pedro Teixeira, a caracterização foi orientada no sentido da identificação completa dos parâmetros através dum programa de medidas aos terminais. O autor apresentou, no entanto, exemplos que verificam a concordância entre os valores dos parâmetros resultantes das medidas com os obtidos a partir duma descrição dimensional e física aproximada. Apresentam-se, na Tabela 6, com indicação dos níveis de modelação, os valores numéricos para os 39 parâmetros do modelo para três transistores de aplicação corrente: 2N918 (sinais fracos, alta frequência), 2N3632 (média potência, alta frequência) e BUW34 (Darlington de alta potência para comutação).

4. EXTENSÃO À MODELAÇÃO DE TRANSISTORES MOS DE POTÊNCIA

O processo de comando da corrente nos transistores MOS é diverso dos bipolares; no entanto, ambos apresentam uma região de baixa condutividade (epidreno/epicolector) em série com a região activa, por forma a suportar altas tensões (fig. 7). Deste modo, é possível caracterizar o funcionamento dos TECMOS de potência em sinais fortes por uma técnica idêntica à utilizada para os bipolares nos parágrafos anteriores [14]: modelação, em blocos independentes, dos principais efeitos que dominam o comportamento aos terminais, nomeadamente o comando da corrente pelo terminal da porta e a resistência não linear do epidreno [15].

O paralelismo existente entre a técnica de modelação utilizada pelo Prof. Pedro Teixeira para os TBP e a seguida pelo seu colaborador J. Costa Freire para

nível III.1	CE + ANB	unidimensional	$I_C < I'_{QS}$
nível III.2	CE + ANB + QS	duas (ou mais) secções	$\gamma_Q < 1$
nível III.3	CE + ANB + QS	unidimensional	$\gamma_Q \geqslant 1$

TABELA 5

TABELA 6

Designação do grupo	unidade	nível do modelo					
		I	II	III	ZN918	ZN3632	BUW34
modelo básico de transporte	A	I_{SO}			$0.6x10^{-15}$	$1.7x10^{-14}$	$4.8x10^{-14}$
	-	β_D			200	92	105
	-	β_I			32	0.6	0.8
componentes laterais e de recombinação	A	I_{BND}			$0.4x10^{-13}$	$9.2x10^{-12}$	$12.3x10^{-13}$
	A	I_{BNI}			$0.85x10^{-14}$	$1.9x10^{-10}$	$6.8x10^{-10}$
	-	n_D			1.390	1.605	1.804
	-	n_I			1.180	1.680	1.590
componentes de retroacção	V		V_{AD}		12.3	14.9	28.4
	V		V_{AI_0}		48	185	240
	-		β_{RD}		980	430	890
	-		β_{RI}		1100	840	940
correntes limiar de alto nível	A		I_{KD}		0.23	1.65	2.42
	A		I_{KI}		0.05	10^2	10^2
tempos de trânsito intrínsecos	ns	τ_D			0.08	0.17	520
	ns	τ_I			$9.6x10^2$	$1.4x10^3$	$9.8x10^3$
tempos de trânsito laterais	ns		τ_{TLD}			0.05	140
	ns		τ_{TLI}			$2.2x10^2$	$8.4x10^3$
capacidades das regiões de transição	pF	C_{OE}			42.40	116.70	242.80
	-	n_E			0.390	0.345	0.383
	V	ϕ_{JE}			0.725	0.737	0.762
	pF	C_{OC}			20.10	55.70	100.4
	-	n_C			0.490	0.410	0.450
	V	ϕ_{JC}			0.605	0.523	0.630
resistência de base	Ω			R_{BO}	540	2.40	0.13
quase-saturação do epico-lector	Ω			R_{CO}	220	6.40	0.85
	V			K_C	$7.20x10^{-12}$	$2.46x10^{-13}$	$7.0x10^{-13}$
	µs			τ_C	1.2	4.9	6.4
disrupção por avalanche e Zener	-			K_{1D}	$0.87x10^{-5}$	$1.69x10^{-5}$	$1.2x10^{-5}$
	-			K_{1I}	0.015	0.010	0.060
	-			K_{2D}	0.030	0.137	0.210
	-			K_{2I}	0.510	0.729	0.605
	A			I_{SZ}	$2.4x10^{-39}$	$1.05x10^{-39}$	$2.1x10^{-38}$
	-			n_{EZ}	16.04	15.18	14.27
resistências adicionais	Ω			R_{BX}	0.60	0.75	0.12
	Ω			$R_{CC'}$	0.47	0.15	0.04
	Ω			R_E	0.80	0.24	0.07
capacidades residuais	pF			C_{pBC}	1.40	6.20	23.1
	pF			C_{pBE}	2.45	10.41	50.2
	pF			C_{pEC}	0.30	3.20	4.9
nº total de parâmetros		15	8	16			

a caracterização da operação dos VVMOS (1) em sinais fortes [16] é realçada pelo esquema básico de ambos os transistores de potência representado na fig. 8, onde é utilizada a mesma topologia para as malhas de entrada e saída, embora com diferentes significados para as respectivas variáveis.

(1) VVMOS: Transistor MOS de canal Vertical e de estrutura com cunha em V (fig. 7).

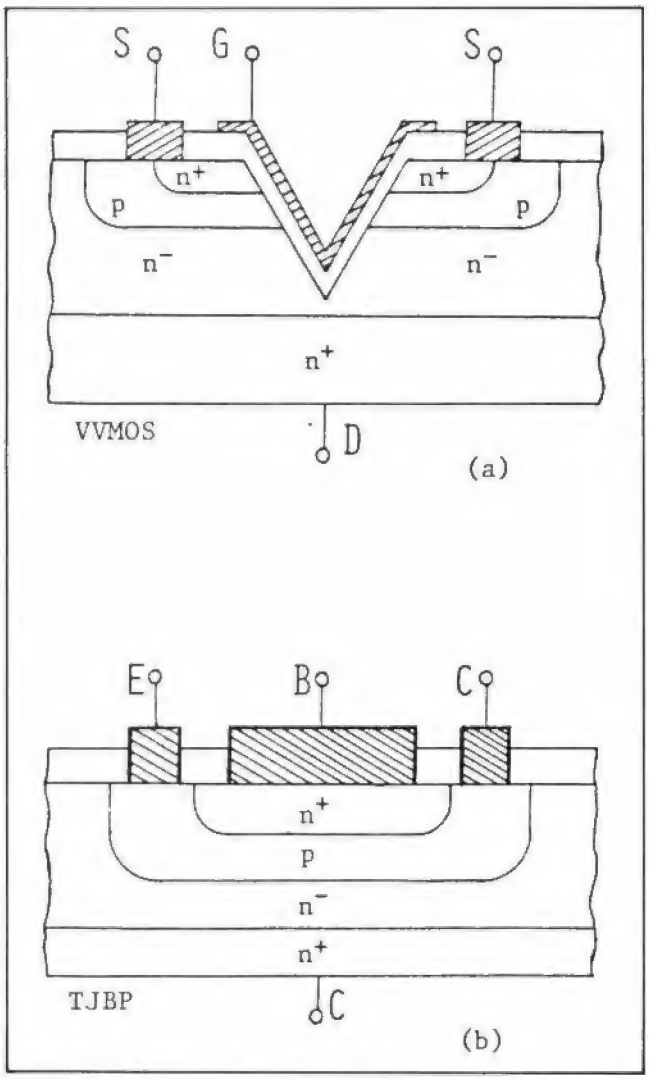


Fig. 7 — Estruturas típicas (a) de um transistor VVMOS e (b) de um TBP

Refira-se que, embora a implementação de ambos os modelos seja similar em termos de circuito básico equivalente, o modelo do TBP é consideravelmente mais elaborado, já que a condução é essencialmente ambipolar, envolvendo fenómenos de alto nível e de armazenamento de portadores minoritários, como se referiu anteriormente. Este facto é salientado na fig. 9, onde se representa de uma forma simplificada os circuitos de implantação no programa SPICE 2 dos modelos desenvolvidos para estes dois tipos de transistores de potência.

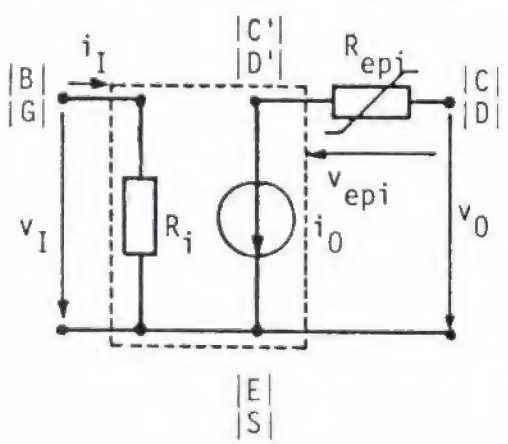
Para o TBP introduzem-se adicionalmente ao modelo de carga integral residente duas resistências não lineares associadas aos fenómenos de desfocalização de emissor (DFE) e de modelação da resistência de colector (RC), um gerador de corrente (Δi_C) que introduz o efeito de variação do ganho h_{FE} na quase-saturação e uma capacidade não linear (Q_{pC}) referente ao armazenamento de portadores minoritários no epicolector. Para o VVMOS é apenas adicionada ao modelo de TECMOS de canal curto, uma resistência não linear (RD) que tem em conta a dispersão da corrente no epidreno e a sua dependência com a configuração do canal junto ao epidreno, e a dependência da mobilidade, nesta última região, com o campo eléctrico. Para a caracterização do epidreno foi utilizada uma técnica de partição regional idêntica à seguida pelo Prof. Pedro Teixeira para o TBP (secção 2.5).

5. EXEMPLOS

Referem-se seguidamente dois exemplos de simulação apresentados pelo Prof. Pedro Teixeira para provar a validade e precisão do modelo por si proposto para o TBP.

5.1. Amplificador de RF de classe C para HF

Este primeiro exemplo corresponde a um caso de diagnóstico: o amplificador de RF de classe C para f≃7MHz, cujo esquema preliminar se apresenta na (fig. 10a) foi correctamente projectado com base nos dados de catálogo.



param.	TJB	VVMOS
i_I	$i_B(v_I, v_0)$	$i_G(v_0)$
i_0	$h_{FE}(v_I, v_0, i_0)\, i_I$	$g_m(v_I, v_0, i_0)\, v_I$
R_{epi}	$R_C(i_0, v_0 - v_I) = R_C(i_0, v_{epi})$	$R_D(v_I, v_0, v_{epi}) = R_D(i_0, v_{epi})$

Fig. 8 — Modelo de circuito elementar para TBP e VVMOS e definição de parâmetros

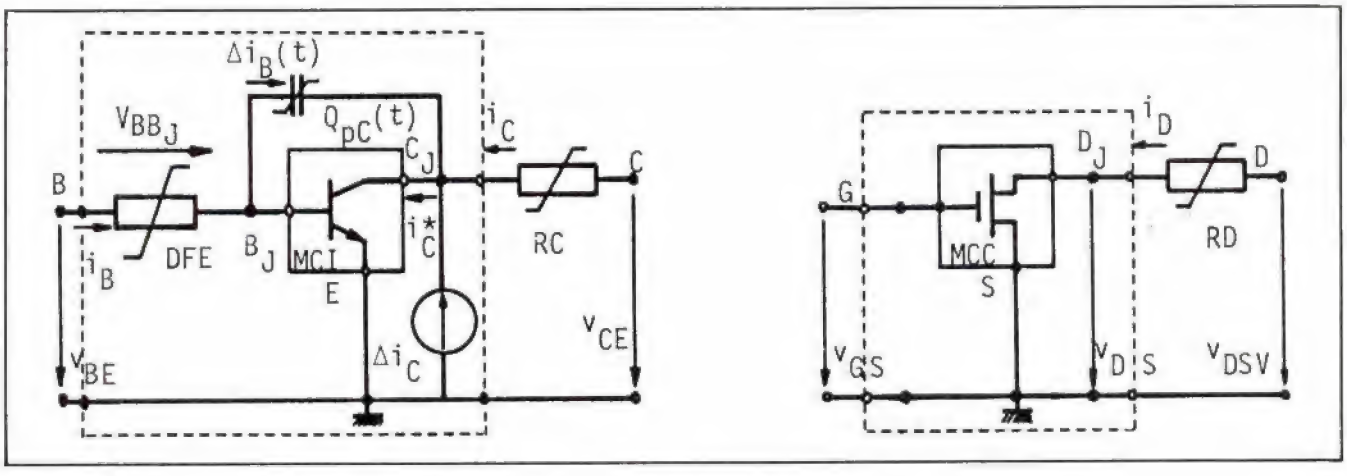
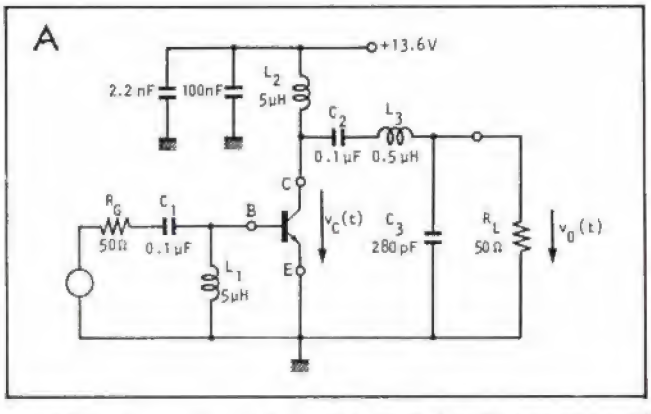


Fig. 9 — Modelos para o TBP e para o VVMOS implantados no simulador SPICE 2

Na construção de diversos protótipos foi possível observar um rendimento de conversão baixo ($\eta_C \simeq 30-$ -40%) e a destruição do TBP por disrupção primária da junção base-colector ($v_{CE_p} > V_{CE_{max}}$). Apresentam-se na fig. 11 os oscilogramas de $v_C(t)$ e $v_O(t)$ para aquele regime de funcionamento precário.

A simulação do circuito da fig. 10, recorrendo ao modelo de nível III, forneceu para $v_C(t)$ e $v_O(t)$ a evolução que se reproduz na fig. 12 (regime permanente). A variação no tempo de $v_C(t)$ é caracterizada por uma componente de alta frequência ($f \simeq 66$MHz), que ocorre por salvas, com uma frequência de repetição igual à do sinal de entrada. O valor de $v_C(t)$ pode, nestas circunstâncias, exceder $V_{CE_{max}}$ indicado pelo fabricante.

Os resultados anteriores permitiram concluir não



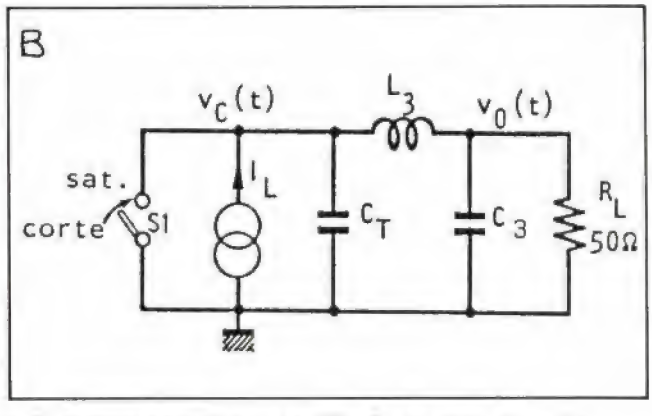


Fig 10 — Amplificador de classe C para HF; a) esquema preliminar; b) circuito equivalente simplificado da malha de saída

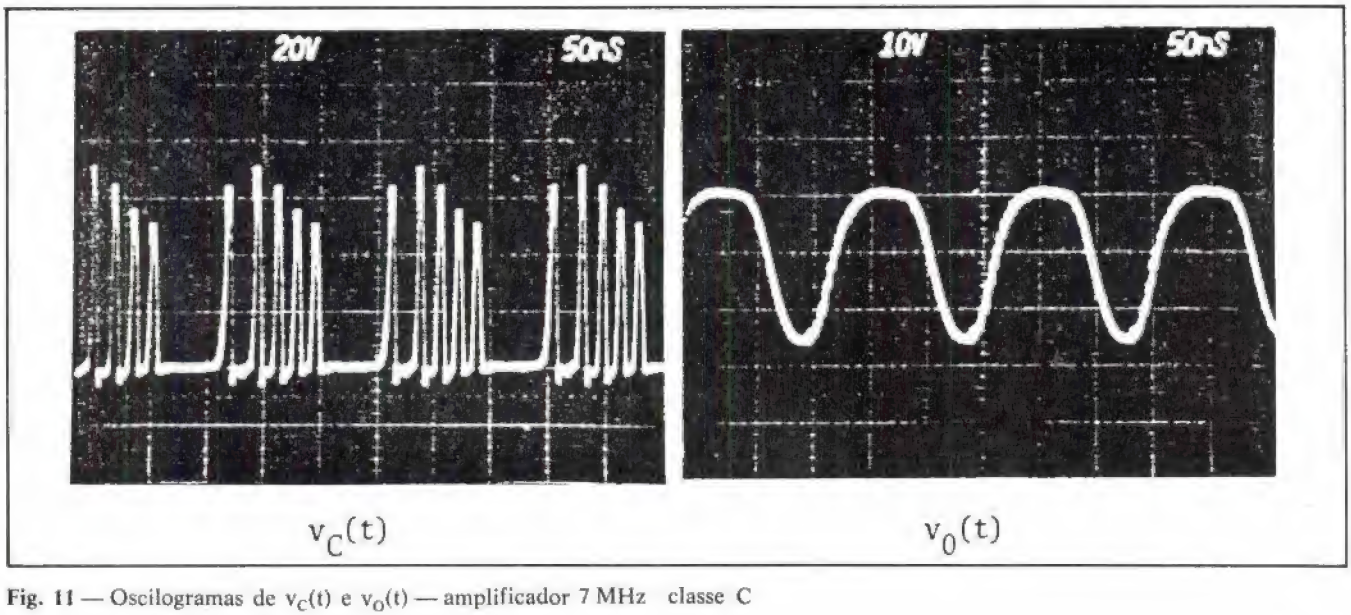


Fig. 11 — Oscilogramas de $v_C(t)$ e $v_O(t)$ — amplificador 7 MHz classe C

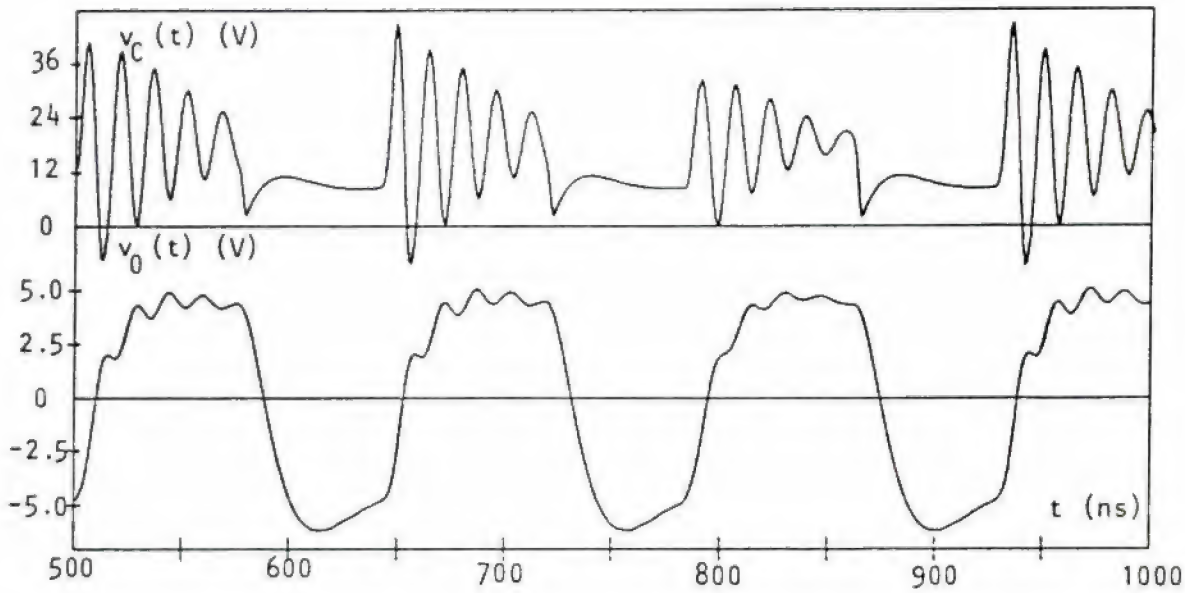


Fig. 12 — Resultados da simulação do amplificador de 7MHz, classe C (modelo de nível III)

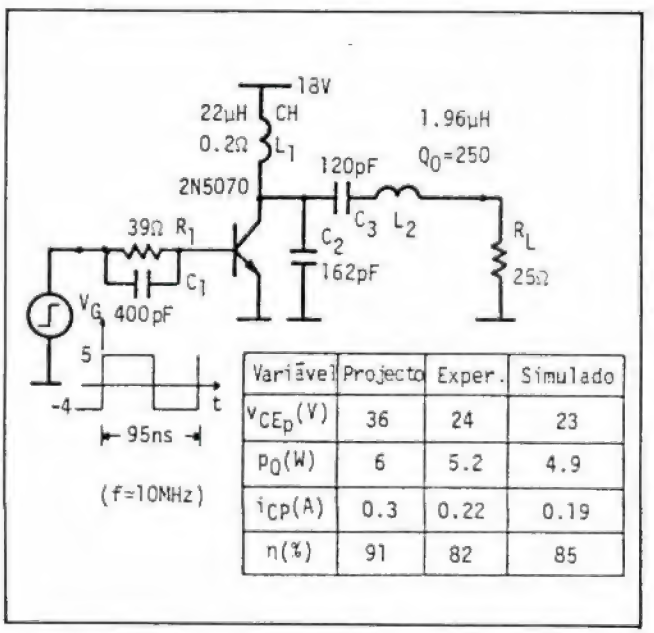
se estar em presença de uma instabilidade propriamente dita, mas sim de um caso particular de excitação da malha de adaptação de saída ocorrendo no período de corte do TBP. Durante este período, a corrente de alimentação I_C (através de L_2) vai excitar o circuito de saída, cuja frequência de ressonância é, nesta configuração, determinada por L_3 e pela capacidade total de saída do transistor C_T, a qual inclui as capacidades parasitas de montagem, de acordo com o esquema da fig. 10b). A forma de onda de $v_C(t)$ é, por conseguinte, dependente do tipo de malha de adaptação de saída empregue no amplificador. Os seus efeitos podem, do ponto de vista do valor máximo de $v_{CE}(t)$, ser minimizados aumentado C_T através da inclusão de uma capacidade adicional entre o colector e a massa de forma a que o novo valor de C_T sintonize L_3 para uma frequência próxima da de trabalho. Dada a configuração da malha, as alterações a efectuar em L_3 e C_3 para reajustamento da adaptação à carga são mínimas.

Foi assinalado ainda pelo Prof. Pedro Teixeira o facto de os resultados da simulação revelarem não serem iguais as amplitudes máximas de $v_C(t)$ em duas salvas consecutivas, o que sugere uma modulação de amplitude adicional. Este efeito não ocorre na simulação com os modelos de nível I ou II, pelo que pode estar relacionado com qualquer efeito (por exemplo, paramétrico) de colector, considerando o autor ser este um assunto em aberto.

5.2. Amplificador (conversor) de classe E

Apresenta-se na fig. 13 o esquema de ligações dum amplificador comutado de classe E. Neste tipo de amplificador, a malha de saída é dimensionada de forma que uma das variáveis $v_C(t)$ ou $i_C(t)$ seja nula quando a outra o não fôr. Consegue-se, deste modo, atingir rendimentos de conversão muito elevados, tipicamente da ordem dos 90%.

Num caso real, o dimensionamento da malha e o desempenho da montagem dependem fortemente das características estáticas e dinâmicas do TBP, em especial das associadas à saturação completa ou parcial, uma vez que o dispositivo funciona como interruptor. É por conseguinte vantajoso o emprego do modelo de nível III na simulação. Os valores dos elementos da malha de saída foram calculados de acordo com o método proposto por Raab [17] que considera, por simplicidade, o TBP no circuito como um interruptor ideal. Procedeu-se seguidamente a uma optimização daqueles valores, através de simulações repetidas, no sentido de assegurar um rendimento de conversão elevado. Apresenta-se, na Tabela 7, a comparação entre os valores calculados, optimizados na simulação, e os



Variável	Projecto	Exper.	Simulado
v_{CEp}(V)	36	24	23
P_0(W)	6	5.2	4.9
i_{Cp}(A)	0.3	0.22	0.19
η(%)	91	82	85

Fig. 13 — Amplificador comutado de classe E

TABELA 7

Variável	Calculado	Simulação	Experimental
C_2 (pF)	174	168	162
C_3 (pF)	110	118	120
L_2 (μH)	1.85	1.96	1.90
V_{CE_p} (V)	36	23	24
i_{C_p} (A)	0.3	0.19	0.22
P_0 (W)	6	4.9	5.2
η_C (%)	91	85	82

valores experimentais de algumas das grandezas e de componentes associados ao circuito da fig. 13. A figura 14a) mostra os oscilogramas de $v_C(t)$ e $i_C(t)$; a fig. 14b) mostra os resultados da simulação do circuito (versão final) para aquelas grandezas.

a) Oscilograma de $i_C(t)$ e de $v_{CE}(t)$

b) Simulação com os modelos de níveis I e III

6. CONCLUSÕES

Apresentou-se neste artigo uma colecção das principais contribuições originais do Prof. Pedro Teixeira para a modelação e simulação de dispositivos activos semicondutores, tendo como destino o projecto de circuitos electrónicos. Para os TBPs, evidenciou-se a modelação da eficiência de injecção da junção do emissor, da recombinação directa no volume da região quase-neutra do emissor, dos efeitos de desfocalização no emissor e de injecção em alto nível na região do epicolector e do regime de operação em saturação parcial. Salientou-se o modelo de comando pela carga integral generalizada proposto pelo autor, e que contém como caso particular o modelo de Gummel e Poon.

Do ponto de vista de simulação, apresentou-se uma hierarquia de modelos proposta pelo Prof. Pedro Teixeira para apoiar o projecto de circuitos de potência, definindo-se o domínio de validade de cada modelo em função das variáveis eléctricas terminais e a forma de determinação dos seus parâmetros.

Os exemplos de simulação descritos procuram salientar a utilidade dos modelos desenvolvidos para o

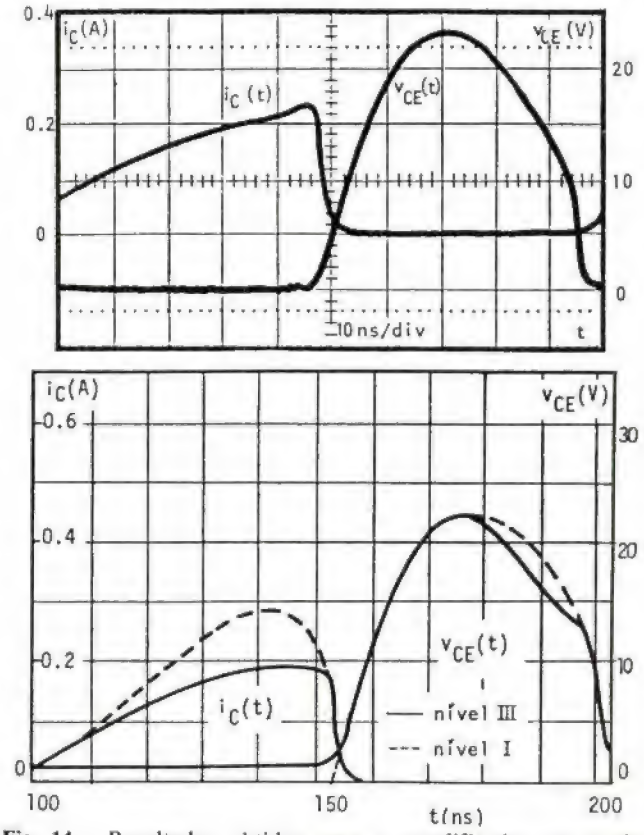


Fig. 14 — Resultados obtidos para o amplificador comutado de classe E

projecto de circuitos, e a indispensabilidade de tomar em consideração efeitos tidos como de segunda ordem em modelos anteriores, não só para a optimização do desempenho dos TBPs como também para garantir o seu funcionamento seguro.

Finalmente, procurou-se dar relevo ao facto de que a estratégia de modelação que o autor empreendeu pode aplicar-se a outros dispositivos activos, nomeadamente a transistores VVMOS de potência.

7. REFERÊNCIAS

[1] W. Shockley, «The Theory of p-n Junctions in Semiconductors and p-n Junction Transistors», Bell Sys. Tech. J., 28, pp. 435-489, 1949.

[2] N. H. Fletcher, «Boundary Conditions for Forward Biased pn Junctions», J. Electron., 2, pp. 609-615, 1957.

[3] P. L. Borges Teixeira, «Caracterização Física de Transistores de Potência para o Projecto de Circuitos e Dispositivos», dissertação de doutoramento, IST, Lisboa, 1983.

[4] W. Shockley, W. T. Read, «Statistics of the Recombination of Holes and Electrons», Phys. Rev., 87, pp. 835-842, 1952.

[5] N. G. Nilsson, «The Influence of Auger Recombination on the Forward Characteristic of Semicondutor Power Rectifiers at High Current Densities», Solid-St. Electron., 16, pp. 681-688, 1973.

[6] W. von Roosbroeck and W. Shockley, «Photon-Radiative Recombination of Electrons and Holes in Germanium», Phys. Rev., 94, pp. 1558-1560, 1954.

[7] H. K. Gummel, «A Charge Control Relation for Bipolar Transistors», Bell Sys. Tech. J., 49, pp. 115-120, 1970.

[8] H. K. Gummel, H. C. Poon, «An Integral Charge-Control Model of Bipolar Transistors», Bell Sys. Tech. Journal, pp. 827-852, Maio/Junho 1970.

[9] L. W. Nagel, «SPICE 2, a Computer Program to Simulate Semiconductor Circuits», University of California, ERL Memo no. ERL-M520, 1975.

[10] J. R. Hauser, «The Effects of Distributed Base Potential on Emitter-Current Injection Density and Effective Base Resistance for Stripe Transistor Geometries», IEEE Trans. Electron Devices, ED-11, pp. 238-242, 1964.

[11] W. M. Webster, «On the Variation of Junction — Transistor Current Amplification Factor with Emitter Current», Proc. IRE, 43, pp. 914-920, 1954.

[12] G. Rey, «Effects de la Défocalization (c.c. et c.a.) sur le Comportement des Transistors à Jonctions», Solid-State Electron, 12, pp. 645-659, 1969.

[13] P. Teixeira, «Modelling of Bipolar Power Transistors for CAD», European Conference on Electronic Design Automation, Brighton, 1981, pp. 29-33.

[14] J. Costa Freire, P. Teixeira, «A Unified Computer Simulation Technique for Bipolar or MOS Power Circuits», International Power Conversion Conference, PCI 82, San Francisco, 1982.

[15] J. Costa Freire, P. Teixeira, «A Multisection Large-Signal Model for MOS Power Devices», 13th European Solid State Device Research Conference, pp. 88-89, Setembro 1983.

[16] J. Costa Freire, «Caracterização Física de Transistores VVMOS de Potência», dissertação de doutoramento, IST, Lisboa, 1984.

[17] F. H. Raab, «Idealized Operation of the Class E Tuned Power Amplifier», IEEE Trans. Circuits Syst., CAS-24, pp. 725-735, 1977.

AS INTERFACES ENTRE AS FONTES DE ENERGIA ALTERNATIVAS E AS DISTRIBUIÇÕES DE ENERGIA ELÉCTRICA EM ÁREAS RURAIS ISOLADAS*

DOMINGOS MOURA

Professor do IST, DEEC, Secção de Energia

RESUMO

As evoluções no conhecimento e no valor real da energia estão a convergir no sentido de tornar o uso das energias alternativas concorrencial com as soluções clássicas para fornecer energia eléctrica a áreas rurais isoladas. Para situar as soluções alternativas perante as soluções clássicas estabelecem-se alguns valores que actualmente caracterizam estas últimas. Depois de estimar as utilizações anuais que se podem esperar das fontes eólicas e das fontes fotovoltaicas, confronta-se a qualidade da energia "bruta" obtida nas novas fontes com as exigências dos utilizadores. Disto resultam os requisitos genéricos para as interfaces. A comunicação termina com uma sugestão sobre critérios de avaliação do interesse dos investimentos.

1. DEFINIÇÕES

1.1 — Fontes de energia alternativas

Por "fontes de energia alternativas" entendem-se apropriações no fluir das energias naturais usando processos tecnológicos não clássicos. Em vez de "fontes de energia alternativas" seria mais apropriado escrever "novas formas de inserção no fluir natural da energia". Contudo a expressão "energias alternativas" está a generalizar-se universalmente; deve esclarecer-se que a expressão exclui a energia nuclear.

Entre as muitas fontes de energia alternativas que, hoje, abundam na literatura técnica — embora abundem menos as realizações concretas — será dada atenção particular, nesta comunicação, aos aerogeradores e às células fotovoltaicas. Afigura-se que são estas as fontes alternativas que, actualmente, merecem mais atenção como futuras competidoras das soluções clássicas, quando se trata de abastecer com energia eléctrica áreas rurais isoladas. As próprias centrais mini e microhidroeléctricas parecem só ter interesse, para este fim, em situações muito particulares. Daí o pouco destaque que, nesta comunicação se dá à energia de origem hídrica embora muito do que adiante se escreve lhe seja aplicável.

Por "redes eléctricas rurais isoladas" entendem-se as que servem centros de consumo em áreas rurais distantes das redes eléctricas de distribuição regionais. As potências de ponta dos diagramas de carga nestas redes isoladas situam-se entre um número digito e poucas centenas de quilowatts.

Excluem-se pois desta designação as redes que servem aglomerados populacionais com muitas centenas ou mais de um milhar de habitantes; excluem-se, também, as cargas isoladas de pequeníssima potência tais como algumas estações repetidoras de sinais de telecomunicação, postos telefónicos ou postos meteorológicos isolados, sinais para a navegação e análogas.

Por "interfaces" entendem-se os conjuntos de equipamentos eléctricos e electrónicos montados entre a fonte primária (veio da turbina eólica ou terminais da célula fotovoltaica, por exemplo) e a rede eléctrica.

Nos centros de consumo em áreas rurais isoladas diversas circunstâncias concorrem para que a energia eléctrica seja usada apenas para fins em que, sem incorrer em grandes incomodidades, não é possível substituí-la por outras formas de energia. Entre essas circunstâncias avultam duas: a) qualquer que seja a fonte primária usada, a unidade de energia eléctrica é muito cara; b) os orçamentos dos consumidores são modestos e não se deverá esperar que reservem parcela importante desses parcos orçamentos para gastos energéticos. Toda uma evolução se processou ao longo de séculos que explica que a área seja "rural" e "isolada"; é algo ingénuo pensar que o fornecimento de energia eléctrica poderá, só por si, inflectir essa evolução.

Acresce que as produções locais de energia eléctrica, com instalações de pequena potência e baixa utilização, não podem garantir qualidade da energia tão elevada como o pode fazer uma grande rede. É certo que não seria razoável esperar que, quanto à energia, se conseguissem, nessas áreas isoladas, altos padrões de qualidade que não se conseguem nem nos serviços de saúde, nem na educação, nem na cul-

* *Comunicação às Jornadas de Engenharia dos Países de Língua Oficial Portuguesa.*

Original recebido para publicação em 9/5/84.

tura, nem nos transportes. Todavia o certo é que a irregularidade no fornecimento da energia eléctrica, as oscilações na tensão e na frequência e outros defeitos, inevitáveis nas produções locais, não atraem os consumos.

Contudo deve ponderar-se que, se a regulação de tensão e a taxa de harmónicas admissíveis para muitos dos receptores instalados na rede rural isolada devem ser análogas às que se obtêm nas grandes redes, já não se afigura necessária nem a apertada regulação de frequência característica da rede europeia interligada ($\pm$ 0,1 Hz) nem a elevada garantia de serviço que nela se verifica.

A fixação dos padrões de qualidade mínima a exigir à energia eléctrica fornecida pelas redes rurais isoladas aguarda ponderado e minucioso trabalho de investigação, sem o qual o desenvolvimento das várias soluções tecnológicas anda à deriva, movido apenas pelos interesses de cada proponente ou pelas divulgações que deslumbram e enganam os financiadores. Neste particular o visar qualidade desnecessária pode ser tão prejudicial como aceitar qualidade insuficiente.

O conhecimento avança, o que tem como consequência baixar o custo real das energias alternativas; o valor real da energia é cada vez maior. As evoluções do conhecimento e do valor da energia convergem no sentido de tornar o uso das energias alternativas concorrencial com as soluções clássicas, cada vez em maior número de situações.

O duplo ataque do problema, simultaneamente pela face tecnológica e pela face económica é por isso, o objecto desta comunicação.

1.2 — Alguns números

Apenas para situar a ordem de grandeza dos valores da potência, do consumo anual e da utilização que se podem, genéricamente, esperar nas redes rurais isoladas, considere-se o exemplo seguinte.

Numa área rural isolada concentram-se vinte potenciais consumidores domésticos. Um inquérito prévio leva a admitir que a potência de ponta total será condicionada pelas seguintes potências parcelares, por consumidor:

5 lâmpadas incandescentes de 60 W	300 W
1 televisor a cores (importante para as acções educativas)	140 W
1 frigorífico	260 W
Total	700 W

A potência de ponta, nos vinte consumidores, será, assim P_m = 14 kW.

Pode admitir-se que o consumo anual, por consumidor, totalizará cerca de 2000 kWh; para este consumo concorrem mais alguns electrodomésticos que se supõe, não estarem ligados na hora de ponta, tais como ferro de engomar, aspirador, torradeira, rádio-receptor e outros. A eventual bombagem de água para usos domésticos poderá também concorrer para o consumo de energia eléctrica.

O consumo, nos vinte consumidores, será, então, W_a = 40 000 kWh / ano. A utilização da potência de ponta será, então, $h_a = W_a / P_m$ = 2860 horas por ano.

Pode concluir-se que as redes rurais isoladas se caracterizam por utilizações medíocres, crescimento de consumo lento e imprevisível e exigências modestas quanto à qualidade da energia eléctrica.

2. SOLUÇÕES CLÁSSICAS

2.1 — Ligação à rede eléctrica regional

As soluções clássicas para o fornecimento de energia a redes rurais isoladas são a construção de um ramal até à rede regional a média tensão ou a instalação de grupos diesel-eléctricos. Outras soluções têm sido usadas mas correspondem a decisões singulares explicadas (nem sempre...) por condicionamentos pouco frequentes.

A ligação à rede de distribuição regional estabelecendo um ramal a média tensão é, na generalidade das situações, a melhor solução tecnológica. Contudo o custo da unidade de energia pode anular o interesse da solução.

O custo C_l de cada quilowatt-hora fornecido na extremidade receptora do ramal pode ser avaliado pela expressão

$$C_l = \frac{I_t \cdot i}{W_a} + f.(1 + \frac{\Delta W_a}{W_a}) \quad [\text{escudos / kWh}] \qquad (1)$$

em que

I_t — investimento total no ramal e terminais [escudos]

i — encargos de capital [escudo . escudo^{-1} . ano^{-1}]

f — preço de compra da energia na emissão [escudo . kWh^{-1}]

W_a — consumo anual [kWh . ano^{-1}]

ΔW_a — energia perdida no ramal e terminais [kWh . ano^{-1}]

O preço de compra da energia na emissão será regido, mais ou menos explicitamente, pela lógica das tarifas binómias. Todavia, para as redes rurais isoladas, será o primeiro termo do segundo membro da expressão 1 que avantajará no custo da energia.

De facto as médias tensões permitem transmitir a distâncias de alguns, ou de algumas dezenas de quilómetros, potências de centenas ou milhares de quilowatts (Sobre estas possibilidades é esclarecedora a sistematização feita no diagrama que se reproduz em anexo e que é extraído da referência [1]). Pode assim concluir-se que o investimento I_t feito para se ligar a rede geral à distribuição regional é sub-aproveitado, verificando-se

$$\frac{I_t \cdot i}{W_a} >> f.(1 + \frac{\Delta W_a}{W_a})$$

O ramal trabalha praticamente em vazio sendo mínimas as perdas na transmissão ΔW_a. Tudo se passa como se o custo C_l dependesse fundamentalmente do número total W_a de unidades de energia veiculadas pelo ramal, sendo secundária a influência do valor da ponta P_m que afecta f.

Se, para alimentar a rede rural exemplificada na alínea 1.2, foi construido um ramal trifásico a 15 kV com 15 km de extensão, a expressão 1 conduz a custo $C_l \approx$ 70 escudos . kWh^{-1}. Para obter este custo admitem-se i = 0,25 ano^{-1} e f = 8 escudos . kWh^{-1}. Um preço f baixo da energia na rede de distribuição regional, não é condição suficiente para se poder oferecer energia eléctrica barata às comunidades rurais isoladas.

É evidente que o aumento do consumo W_a pode mudar esta situação e tal possibilidade deve ser examinada com cuidado. Todavia nas áreas rurais isoladas o crescimento do consumo é, em geral, imprevisível e provavelmente muito lento, como já se notou.

2.2 — Central diesel-eléctrica

Entre as máquinas térmicas que garantem razoável continuidade no serviço, o motor diesel é a mais barata por quilowatt instalado, isto para as pequenas potências adequadas às redes rurais isoladas. Explica-se assim a sua larguíssima difusão que é explicada, também, por se dispor, em qualquer local habitado, de rede de distribuição de combustível e de assistência competente: a rede e a assistência que servem os motores dos transportes rodoviários de mercadorias.

No Quadro 1 indicam-se custos unitários actuais (1983) de centrais diesel-eléctricas de pequenas potência. Os custos incluem os equipamentos auxiliares e a construção civil.

QUADRO 1 — Custos de centrais diesel-eléctricas (1983)

Potência instalada	Velocidade angular dos grupos	Custo unitário
P_i [kVA]	n [rot. min^{-1}]	I_1 [10^3 escudos/kW]
1 x 25	1500	70
1 x 125	1500	45
1 x 625	1500	40
1 x 625	1000	70
1 x 1250	1500	40
1 x 1250	1000	70

Admita-se que, para alimentar a área rural isolada que se descreve na alínea 1.2 o investimento na central era $I_1 = 80.10^3$ esc/kW, que a utilização era $h_a = 2860$ hora ano^{-1}; admita-se ainda que por cada quilowatt-hora fornecido ao consumidor se gastavam 0,3 kg_m de gasóleo ao preço de 30 esc/kg_m (f.o.b. Roterdam, 1 dólar USA < > 120 escudos, 1983). Então o custo unitário da energia será

$$C_1 = I_1 . i/h_a + 9 \approx 16 \text{ escudos/kWh} \qquad (2)$$

isto se for $i = 25\%$ ao ano a taxa de encargos com o investimento.

O exame pormenorizado da economia das centrais diesel-eléctricas, em áreas rurais isoladas, não é o objecto desta comunicação. Todavia para melhor situar as fontes de energia clássicas perante as fontes de energia alternativas convém referir ainda o seguinte:

a) Para garantir razoável continuidade no fornecimento deverá dividir-se a potência instalada por dois ou três grupos. Isto elevará o investimento para cerca de 100.000 escudos por quilowatt da ponta.

b) O funcionamento deverá ser fortemente automatizado para evitar a necessidade de pessoal acompanhando permanentemente a exploração.

c) Os encargos com a exploração serão muito atenuados se o funcionamento da central se fizer apenas durante cerca de 16 horas diárias (das 7 às 23 horas, por exemplo). Todavia o funcionamento não permanente impede o uso do frigorífico doméstico eléctrico o qual, além de ser comodidade muito desejada pelos consumidores, contribui fortemente para aumentar a utilização da potência de ponta.

Tendo em conta encargos que não se consideraram ao calcular o valor de C_1 (expressão 2) tais como

— transporte do combustível até à central;
— pessoal atento ao funcionamento;
— lubrificantes;
— revisões;
— reparações e substituição de peças;

pode admitir-se que o custo da energia fornecida aos consumidores será cerca de 20 a 25 esc/kWh. Este custo é hoje (1983) um dos padrões para avaliar o interesse de fontes alternativas. O seu valor, sem dúvida elevado, abre perspectivas a estas fontes de energia.

A economia da produção de energia eléctrica pode, em princípio, ser melhorada se parte do calor dos gases de escape dos motores for recuperada, aquecendo água, depois utilizada para fins domésticos.

Tendo em conta que os gases de escape estão a temperaturas entre 200 e 300° C não se afigura difícil transferir boa parte da sua energia térmica para água que se acumula em recipiente termicamente isolado; o recipiente alimentará os consumidores domésticos.

Esta recuperação merece ser cuidadamente estudada e demonstrada.

3. ENERGIA DO VENTO

O estudo dos aerogeradores está suficientemente avançado para ser possível uma primeira avaliação da energia que se pode extrair do vento [2], [3], [4], [5].

De [2] extrai-se o Quadro 2 que indica qual a potência P_T [kW] que se pode obter de turbinas eólicas com pás de diâmetro D[m], admitindo um factor de aproveitamento $C_p = 0,3$, para diferentes velocidades do vento v [km . h^{-1}].

QUADRO 2 — Potência de turbinas eólicas [kW]

D [m]	v = 10	20	30	45 [km . h^{-1}]
2	0,012	0,1	0,33	1,1
5	0,078	0,6	3	7
10	0,31	2,5	8,4	28
20	1,24	9,9	33	113
40	5	40	134	452
60	11,2	89	301	1017
100	31	248	837	2825

O Quadro 2 é obtido a partir da expressão

$$P_T = C_p . v^3 . D^2 . 10,35.10^{-6} \text{ [kW]} \qquad (3)$$

Como se sabe [3], [4] o factor de aproveitamento, sempre inferior ao limite de BETZ (C_p limite = 0,593), raramente ultrapassa o valor 0,45, encontrando-se dispositivos que não ultrapassam $C_p = 0,15$.

A expressão 3 mostra a fortíssima dependência da potência P_T com a velocidade v : P_T varia com o cubo da velocidade. Desta dependência resulta que a energia eólica se adapta com dificuldade a abastecer consumidores que requerem grande regularidade no fornecimento de energia. Estão nesta situação os consumidores domésticos que pretendem ver a televisão diariamente, precisam de iluminação todas as noites, têm o frigorífico permanentemente ligado à

rede. Por isso afigura-se que os aerogeradores, só por si, não podem assegurar o abastecimento das redes rurais isoladas.

Diversas são as possibilidades para complementar a energia do vento: por exemplo armazenamento electroquímico ou grupos diesel-eléctricos. O uso simultâneo de aerogeradores e de células fotovoltaicas regulariza o diagrama de produção mas não dispensa os equipamentos complementares que se referiram.

A exploração conjunta destes equipamentos é pista a investigar e demonstrar. Todavia, desde já se retem, que a necessidade de complementar as fontes eólicas quando se destinam a abastecer redes rurais isoladas é condicionante a ter em conta ao escolher as interfaces entre o motor e a rede eléctrica. Situação muito diferente é a ligação de aerogeradores a redes eléctricas de grande dimensão às quais estão ligadas outras fontes de grande potência, mas não é disso que se está a tratar.

Uma grandeza que importa conhecer é a utilização que se pode esperar dos aerogeradores; alguns números começam a delinear-se baseados nas primeiras explorações à escala industrial.

Para aerogeradores instalados em áreas em que a probabilidade acumulada P'_o [%] de ocorrência de ventos com a velocidade v [m. seg^{-1}] ou maior, se aproxima da expressão

$$\log_{10} P'_o = 2 - \frac{v}{15} \qquad (4)$$

e em que a característica mecânica (P_T, v) é a representada na figura 1, a utilização da potência nominal parece ser da ordem de 2000 horas por ano (a utilização de 2000 h é extraída de um trabalho elaborado pelo Assistente Estagiário Eng.º Fernando Nunes). Esta utilização só é possível se toda a energia eólica apropriável pelo aerogerador for utilizada.

A apropriação da energia eólica com o rendimento máximo obriga a variar a velocidade angular consoante a velocidade do vento [3], [2]. Regista-se, pois, que a energia eólica se adapta bem à obtenção de tensões alternadas, mas de frequência variável. Uma pista a investigar e a demonstrar é a redução na energia anualmente extraível dos aerogeradores quando são regulados a velocidade constante. Esta informação é importante para escolher a interface eléctrica a usar quando a energia eólica se destina a abastecer redes rurais isoladas.

Contudo a irregularidade no fluir da energia eólica pouco afectará outros usos também importantes para os consumidores rurais: bombagem de água, moagem de cereais, refrigeração e aquecimento e outras actividades importantes na agricultura ou que a complementam. Neste particular o uso da energia eólica, embora sem passar pela forma eléctrica, tem secular tradição em Portugal.

4. GERADOR FOTOVOLTAICO

O estudo dos geradores fotovoltaicos está, também, suficientemente avançado para se avaliar, com alguma segurança, a energia que anualmente poderão fornecer [7], [8], [9], [10].

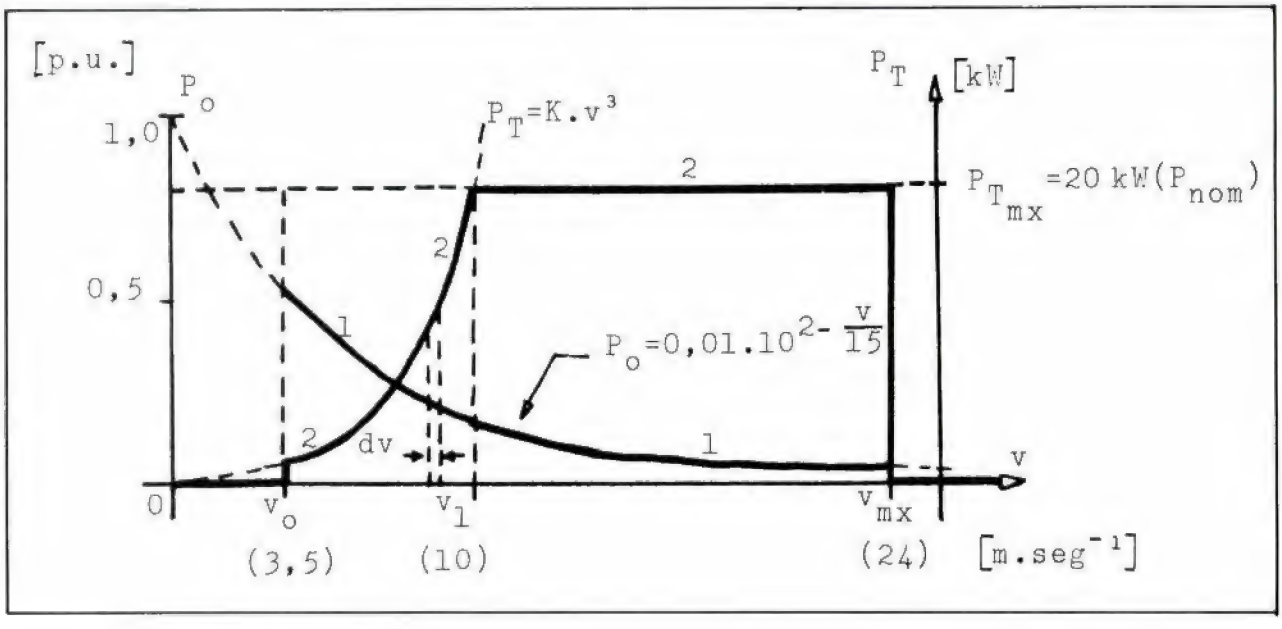
Embora se façam grandes esforços para melhorar o rendimento das células fotovoltaicas, o interesse dos investigadores põe a tónica na redução do custo por unidade de potência — progresso que se afigura menos difícil. Contudo só grande redução nos custos actuais tornará interessante o uso das células fotovoltaicas para alimentar redes rurais isoladas.

De facto a utilização anual h_a [horas . ano^{-1}] da potência de ponta P_p das células fotovoltaicas é dada por

$$h_a = P_{med} \times 8760 \times \eta \qquad (5)$$

em que P_{med} é a potência média anual [kW] da radiação incidente e η o rendimento [p.u] do equipamento entre os terminais da célula e a rede eléctrica. A potência de

FIGURA 1 — (extraída de [2]) —



curva 1 — Probabilidade acumulada (P'_o, v).
curva 2 — Característica mecânica (P_T, v).
v_o — velocidade de arranque.
v_1 — velocidade a que se define a potência nominal $P_{T\,nom}$.
v_{mx} — velocidade de corte.

ponta é definida para o feixe incidente convencional de 1000 W / m^2.

Para as potências médias anuais P_{med} (média das 8760 horas) entre 150 e 250 W / m^2 [8], que se obtêm nas zonas em que a conversão fotovoltaica tem mais interesse, a utilização anual da potência de ponta variará entre 920 h. ano^{-1} e 1540 h. ano^{-1}. Valores tão baixos tornam difícil a competição com outras fontes de energia.

Para que o custo por quilowatt-hora não exceda f = 0,2 \$USA / kWh (cerca de 26 escudos em Janeiro de 1984) o investimento por quilowatt de ponta I_{pl} não deverá exceder $I_{pl} < h_a \cdot f / i$. Para encargos anuais de capital i = 0,2 (isto é 20% por ano) obtém-se $I_{pl} < h_a$ ou seja um investimento entre 920 e 1540 \$USA / kW$_p$.

Os preços actualmente praticados são cinco a dez vezes superiores. Todavia há razões para admitir que os preços dos conversores fotovoltaicos continuarão a descer rapidamente [8].

A energia obtida nas células fotovoltaicas oferece vantagens sobre a obtida nos aerogeradores: as variações na energia afluente são muito mais lentas (nada ocorre comparável às rajadas do vento); a afluência da energia solar é muito mais regular e previsível; entre os paralelos 40° N e 40° S a energia solar é uma fonte aproveitável, uniformemente distribuida, enquanto os ventos com velocidades médias aproveitáveis apenas ocorrem em pequenas áreas [4]; por isso, no futuro, poderá suportar programas nacionais de fornecimento de energia eléctrica a áreas rurais isoladas, muito melhor do que a energia do vento.

5. A QUALIDADE DA ENERGIA DAS FONTES ALTERNATIVAS

Os aspectos da qualidade da energia eléctrica que são importantes para a alimentação de redes rurais isoladas são:

a) garantia da continuidade do serviço;
b) regulação da tensão;
c) forma da onda;
d) regulação da frequência.

Outros aspectos, importantes para fontes ligadas a grandes redes, tais como a estabilidade síncrona e as trocas de energia reactiva, não são relevantes para as redes rurais isoladas. Deve acrescentar-se que os equipamentos electrodomésticos fabricados em grandes séries, são construídos para alimentação em corrente alternada e por isso a rede rural deverá receber da interface uma tensão alternada, bem regulada, sinusoidal e com frequência constante.

A garantia da continuidade do serviço é importante para os frigoríficos domésticos e para a iluminação. Menos importante para a televisão e para a rádio-recepção, admite interrupções não programadas, com duração de algumas horas, quando se trata dos outros electrodomésticos mencionados na subalínea 1.2. Já se notou, a propósito da energia de origem eólica, que a garantia da continuidade do serviço pouco interesse tem para usos que são importantes nas comunidades rurais: rega, moagem e outros trabalhos complementares da agricultura e pecuária. Mesmo a refrigeração de produtos agrícolas admite interrupções no fornecimento da energia eléctrica desde que o "frio" se armazene em massas de gelo ou por processos equivalentes. Isto que não é cómodo para usos domésticos, é realizável, com economia, nas indústrias agrícolas.

Aceita-se a regulação da tensão numa banda relativamente larga: variações de ± 5% são, de um modo geral, aceitáveis; redução até −10%, embora inconveniente, não é impeditiva do uso da maioria dos receptores. Regulações da tensão, dentro destas bandas, são fáceis de conseguir com as fontes de energia alternativas.

Quanto à forma de onda a situação é diferente quando a energia passa pela forma mecânica, caso em que a obtenção de tensões sinusoidais com taxa de harmónicas mínima é solução natural, ou quando se usam células fotovoltaicas que nos seus terminais dão uma tensão contínua.

A frequência deverá manter-se numa faixa de ± 1 a 2%. Nas turbinas eólicas e também nas turbinas hidráulicas de pequena potência, a regulação a velocidade constante, com esta tolerância, não apresenta dificuldades técnicas, mas tem dois inconvenientes: a) o custo dos equipamentos de regulação; b) a redução da quantidade de energia que é fornecida pela turbina.

Confrontando as exigências de qualidade com a qualidade da energia fornecida pelos conversores primários (turbinas ou células fotovoltaicas) ressaltam algumas das orientações que devem presidir à escolha das interfaces e das suas características funcionais.

Em primeiro lugar parece indispensável o recurso à acumulação da energia: são inevitáveis as calmarias que anulam qualquer possibilidade de extrair energia do vento durante 10 a 30% das horas do ano; as variações da potência da radiação solar não seguem o diagrama de carga; a irregularidade da afluência da energia hídrica é, em geral, muito grande, a tal ponto que só em casos particulares tem interesse o uso das centrais mini ou microhidroeléctricas para abastecer redes rurais isoladas, sem forte apoio diesel-eléctrico.

Das acumulações de energia possíveis apenas se afigura com interesse para redes rurais isoladas a acumulação electroquímica. Adiante algo se acrescentará sobre este assunto; por agora retem-se que a interface deverá incluir acumuladores electroquímicos ou grupos diesel-eléctricos (que têm energia acumulada no depósito de combustível) ou ambos os equipamentos.

Do confronto da necessidade de tensões alternadas, com a tensão contínua dada pelas fontes fotovoltaicas resulta necessária a conversão contínua-alternada o que sugere o uso de pontes conversoras. É sabido que as pontes conversoras podem ser usadas como conversores da frequência variável em frequência constante. Se forem usadas com este fim podem evitar o uso de reguladores de velocidade nas turbinas, permitindo a apropriação das energias naturais com o rendimento máximo. Retem-se pois que, em qualquer caso, as pontes conversoras são componentes a usar na interface.

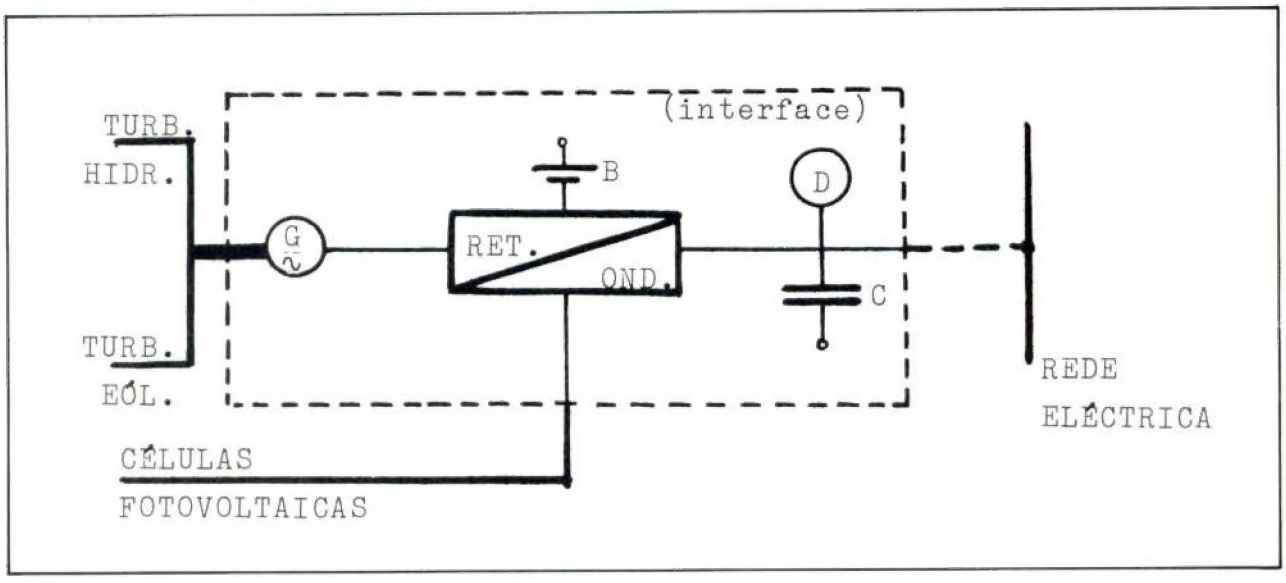
A tensão de saída das pontes onduladoras embora facilmente regulável em amplitude e frequência, contem taxa de harmónicas incompatível com boa parte dos usos que interessam aos consumidores rurais.

Não é conhecida definição fundamentada das taxas de harmónicas que impedem o uso dos receptores que interessam às comunidades rurais. Parece evidente que as lâmpadas incandescentes pouco ou nada são afectadas, que os receptores rádio podem ser muito afectados e que os motores eléctricos estarão numa situação intermédia. Todavia tudo isto é vago e requerem-se quantificações precisas. É outra pista que requer estudo e demonstração; pode, contudo, reter-se que as interfaces deverão incluir filtragens nas saídas com frequência estabilizada.

6. INTERFACES

Da alínea anterior pode concluir-se que uma interface genérica terá a constituição descrita pela figura 2. Esta in-

FIGURA 2 — Interface genérica, sem os órgãos de controlo.



terface genérica permite analisar um modelo único, embora a potência e o modo de funcionamento dos diversos componentes variem de caso para caso. Alguns desses componentes (o grupo diesel-eléctrico, por exemplo) poderão até, ser suprimidos o que corresponderá a casos-limite da situação modelada.

Do gerador G, qualquer que seja, obtem-se, provavelmente, frequência variável o que justifica a rectificação e subsequente ondulação. A irregularidade na afluência quer da energia eólica quer da radiação solar, justifica a acumulação electroquímica. A grande irregulariadade na afluência da energia hídrica só pode ser compensada por grupos diesel-eléctricos. A pesada taxa de harmónicas na saída do ondulador e as trocas de energia reactiva justificam a filtragem e compensação C.

Equipamentos complementares, variantes nas ligações e outros arranjos são, evidentemente, possíveis e a literatura especializada está cheia de sugestões quanto a interfaces possíveis. (Ver, por exemplo, o Capítulo 3 da referência [3]). Alguns dos arranjos que não se enquadram na tentativa de sistematização representada na figura 2, têm mérito em situações particulares. Todavia afigura-se que as soluções redutíveis ao esquema genérico da figura 2, são as que, mais provavelmente se vão generalizar.

Os componentes da interface descrita (gerador síncrono, gerador hipersíncrono, rectificador, ondulador, acumulador electroquímico, condensador) são bem, ou pelo menos razoavelmente, conhecidos pelos electrotécnicos. O que é necessário investigar são as interacções nos sistemas em que coexistem e interactuam alguns ou todos estes componentes; e quais as características nominais óptimas para cada componente. Os principais condicionamentos resultarão do diagrama de carga e da qualidade de energia que se pretendem na rede alimentada.

Já se notou que do confronto entre a irregularidade da afluência da energia nas fontes primárias e as exigências de continuidade dos consumidores, resulta a necessidade de recorrer a acumulações por via electroquímica. Outros meios de acumulação de energia serão, certamente, possíveis no futuro, mas em 1984, para redes rurais isoladas, a acumulação electroquímica ainda se afigura preferível. Pode perguntar-se qual o tipo de acumuladores a usar.

Os acumuladores "chumbo-ácido" usados nos veículos rodoviários são construidos para satisfazer solicitações de grandes potências durante os curtíssimos tempos do arranque e fóra disso apenas funcionam como regularizadores (maus) da alimentação dos faróis, da ignição e pouco mais. Para estes fins bem específicos, desenvolveram-se determinados tipos de acumuladores de chumbo com electrólito ácido que se adaptam mal ao armazenamento e devolução da energia eléctrica nas redes rurais isoladas: por exemplo a energia armazenada por unidade de massa, a insensibilidade à temperatura ambiente, a possibilidade de cargas e descargas rápidas são muito importantes nos veículos e quase indiferentes nos usos estacionários; precisamente o contrário acontece quanto ao rendimento (energia) e ao custo inicial.

Existem acumuladores electroquímicos que usam outras reacções e satisfazem melhor os requisitos das redes rurais; e estão a desenvolver-se outros tipos (por exemplo acumuladores secundários sólidos) que poderão vir a revelar-se ainda mais adequados. Todavia a assistência universalmente estabelecida é a que serve os acumuladores "chumbo-ácido" da tracção rodoviária; é imprudente contar com esta assistência para a inspecção, manutenção e reparação de outros tipos de acumuladores.

É da experiência comum a importância que a assistência tem para a eficiência e duração dos acumuladores electroquímicos. Por isso justificam-se dúvidas, longe de estar esclarecidas, quanto à linha de desenvolvimento que interessa seguir: ou aproveitar as novas soluções para a acumulação electroquímica e pode perguntar-se como se assegura a assistência em locais distantes dos grandes centros tecnológicos; ou tentar desenvolver tipos "chumbo-ácido" melhor adaptados às exigências das redes rurais.

7. CRITÉRIOS DE VALORIZAÇÃO ECONÓMICA

Na figura 3 a curva 1 representa o diagrama de carga sobre uma rede rural isolada. A curva 2 representa como varia no tempo a potência fornecida por uma fonte alternativa. A potência pedida pela rede, P'_D acima de P_{m2}, é fornecida por uma central diesel-eléctrica.

A energia fornecida pela fonte é $W_f = W_{f1} + W_{f2}$. A parcela W_{f2} carrega a bateria que restitui $W_B = \eta_B \cdot W_{f2}$ sendo η_B o rendimento global do armazenamento electroquímico. Ao consumidor é fornecida a energia $W_{f1} + W_B + W_D$, sendo a parcela W_D obtida na central diesel-eléctrica. Admita-se que no diagrama representado T = 24 horas e que o diagrama se repete todos os dias do ano.

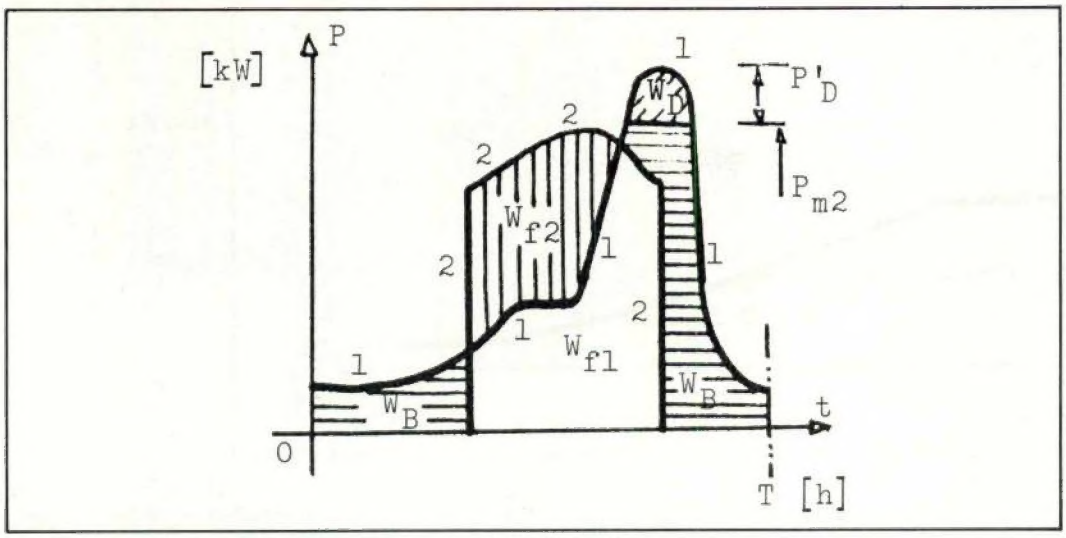


FIGURA 3
— Diagramas.

Se for aumentada a potência nominal da fonte alternativa será menor a energia W_D pedida à central diesel, mas será também menor a utilização da potência da fonte alternativa. Note-se que a capacidade da acumulação química cresce com a potência nominal da fonte alternativa.

O grupo diesel-eléctrico terá a potência $P_D > P'_D$; a potência P_D justificar-se-á para garantir a segurança do abastecimento de cargas essenciais. Com a variação da potência nominal da fonte alternativa não varia a potência P_D, apenas varia a quantidade de energia W_D que a central fornece.

Seja I_{FBl} o investimento unitário [escudos / kW] no conjunto "fonte alternativa + bateria", sendo u_{FB} a utilização do conjunto, referida à potência nominal da fonte,

$$u_{FB} = 365 \frac{W_{fl} + W_B}{P_F} \tag{6}$$

Se for

$$u_F = 365 \frac{W_f}{P_F} \tag{7}$$

será

$$u_{FB} = u_F \; [1 - K(1 - \eta_B)] \tag{8}$$

Como se sabe u_{FB} mede o número de quilowatt-hora fornecido por ano à rede por cada quilowatt de potência nominal da fonte.

Se a parcela $\alpha \, . \, I_{FB}$ do investimento for paga inicialmente ($t = 0$) e se os encargos do capital em dívida forem anualmente $\gamma \, (1 - \alpha) \, I_{FB}$, durante o tempo t_n, os dispêndios durante o tempo t_n, actualizados à taxa **a** e deflacionados à taxa **b**, serão

$$\alpha \, I_{FB} + \sum_{t = t_l}^{t = t_n} \frac{\gamma \, (1 - \alpha) \, I_{FB}}{(1 + a + b)^t}$$

a que há a acrescentar os encargos com a exploração (revisões, reparações e substituições de componentes)

$$\sum_{t = t_l}^{t = \tau} \frac{R_t}{(1 + a + b)^t}$$

em que R_t é o encargo de exploração (por unidade de potência P_F) pago ao fim de cada intervalo de tempo $t_l \ldots\ldots \tau$ e τ a vida física do equipamento.

As receitas podem ser valorizadas pelo somatório

$$\sum_{t = t_l}^{t = \tau} \frac{f_D \, . \, u_{FB} \, (1 + c)^t}{(1 + a + b)^t} =$$

$$= f_D \, u_F \, [1 - K(1 - \eta_B)] \frac{(1 + c)^t}{(1 + a + b)^t} \tag{9}$$

em que **c** é a taxa de deriva dos preços da energia diesel f_D; deverá acrescentar-se o valor final V_f do equipamento, decorrido o tempo τ, (também actualizado e deflacionado), [escudo . kW^{-1}],

$$\frac{V_f}{(1 + a + b)^\tau}$$

Usando o critério do "Balanço Actualizado", a utilização u_F que anula a soma algébrica de receitas com despesas é

$$u_F = \left[\alpha \, I_{FB} + \sum_{t_l}^{t_n} \frac{\gamma \, (1 - \alpha) \, I_{FB}}{(1 + a + b)^t} + \sum_{t_l}^{\tau} \frac{R_t}{(1 + a + b)^t} - \frac{V_f}{(1 + a + b)^\tau} \right] \cdot \frac{1}{f_D \, [1 - K(1 - \eta_B)] \sum_{t_l}^{\tau} \frac{(1 + c)^t}{(1 + a + b)^t}} \tag{10}$$

O exame do diagrama de carga permite estabelecer a ligação entre a potência nominal P_F da fonte e a sua utilização u_F (figura 4).

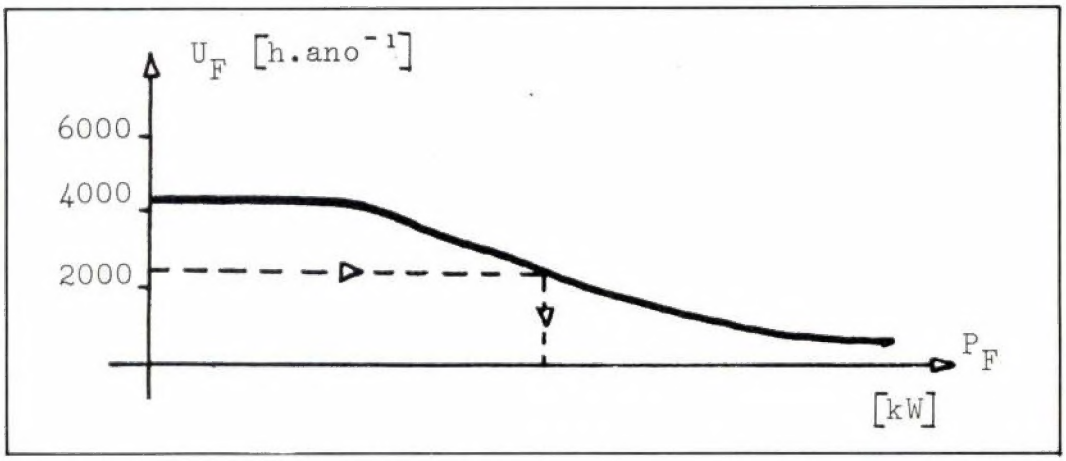


FIGURA 4
— Função u_F (P_F).

Fixado u_F pelo critério acima (expressão 10) fica definida qual a potência P_F a instalar.

O valor a atribuir à energia fornecida pela fonte alternativa (valor de f_D nas expressões 9 e 10) poderá ser o valor dos encargos marginais da produção diesel. Isto corresponde à hipótese feita, das variações de P_F não afectarem a potência do grupo diesel P_D, ou seja que em qualquer caso $P'_D < P_D$.

Obviamente do exame dos diagramas da figura 3, pode extrair-se a função u_{FB} (P_F). Nesse caso a expressão 10 será alterada para dar imediatamente u_{FB}.

BIBLIOGRAFIA

1. DOMINGOS MOURA — "Nota sobre os domínios de utilização das médias tensões no transporte de energia eléctrica" — in TÉCNICA, n.º 353, 1965, págs. 135-139.
2. DOMINGOS MOURA — "A energia do vento" — Capítulo 21 do curso sobre "Fontes de Energia para Redes Eléctricas"; 1983, Instituto Superior Técnico, Lisboa.
3. BRITISH WIND ENERGY ASSOCIATION (editor) — "Wind Energy for the Eighties", livro publicado por Peter Peregrinus, Ltd., Stevenage (U.K.), 1982.
4. W. PALZ, W. SCHNELL (editors) — "Wind Energy" — Solar Energy R & D in the Europeian Community, Series G, Volume 1 — Proceedings of the E.C. Contractors Meeting held in Brussels, 23-24 November, 1982 — D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, Holanda.
5. VASCO BREDERODE — "Energia Eólica" — Relatório apresentado no Seminário sobre Tecnologia de Novas Energias, organizado pelo LNETI, Vimeiro, 1982.
6. DOMINGOS MOURA — "Visão Prospectiva da Energia Eléctrica no Panorama Energético Português — in TÉCNICA, n.º 464, 1983, págs. 5-13.
7. C.E. BACKUS — "Solar Cells" — The Institute of Electrical and Electronic Engineers, 1976, New York — (IEEE PRESS Selected Reprint Series).
8. F.C. TREBLE — "Solar Cells" — IEE Proceedings, November 1980, págs. 505-527.
9. L. GUIMARÃES, L. ALCACER — "A conversão fotovoltaica da energia solar" — Relatório apresentado no Seminário sobre Tecnologia das Novas Energias, organizado pelo LNETI, Vimeiro, 1982.
10. DOMINGOS MOURA — "Células Fotovoltaicas" — Capítulo 20, do curso sobre "Fontes de Energia para Redes Eléctricas", 1983, Instituto Superior Técnico, Lisboa.